



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
NÚCLEO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Modelo de Heisenberg com campo aleatório e interação Dzyaloshinskii-Moriya

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Joeliton Barros da Silva

São Cristóvão/SE

Fevereiro/2018

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
NÚCLEO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Joeliton Barros da Silva

**Modelo de Heisenberg com campo aleatório e
interação Dzyaloshinskii-Moriya**

Dissertação apresentada ao Núcleo de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Sergipe como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Douglas F. de Albuquerque

São Cristóvão/SE

Fevereiro/2018

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE
Núcleo de Pós-Graduação em Física

**“Modelo de Heisenberg com campo aleatório e interação
Dzyaloshinskii-Moriya”**

por

JOELITON BARROS DA SILVA

Dissertação de mestrado APROVADA em sessão pública no dia vinte e seis de fevereiro do ano dois mil e dezoito perante a banca examinadora constituída pelos seguintes professores:



Prof. Dr. Douglas Ferreira de Albuquerque
(DMA-UFS)



Prof. Dr. Nelson Orlando Moreno Salazar
(DFI-UFS)



Prof. Dr. Augusto dos Santos Freitas
(IFS-Lagarto/SE)

*Aos meus pais,
Antônio e Valdice.*

Agradecimentos

Agradeço ao professor e orientador Douglas F. de Albuquerque, pela amizade e confiança na capacidade e competência para a realização da pesquisa.

Ao professor José Ricardo de Sousa, pela aceitação do convite a fazer parte da banca. No entanto, por motivos de força maior não pôde comparecer.

Aos professores Augusto Freitas, João Batista e Cláudia Adriana, por muitas contribuições durante as minhas iniciações científicas na graduação, que foram importantes para a minha formação e ingresso no mestrado.

A todos os professores do Departamento de Física da UFS que direta ou indiretamente contribuíram para a minha formação. Particularmente agradeço aos professores Mário Ernesto G. Valerio, Nelson O. M. Salazar e Francisco A. G. de Almeida, pelos conhecimentos transmitidos nas disciplinas durante o mestrado.

Agradeço à Vívica, minha noiva, pelo apoio, companheirismo e prestimoso convívio de sempre.

Aos colegas de residência, os irmãos Jailsson e Jaelsson. Ao meu irmão, José Jaédson. A Bruno, Adelino, José Anselmo e todos os colegas de pós-graduação. Aos secretários do NPGFI, Álvaro e Camila.

Por fim, às agências CAPES/FAPITEC, pelo suporte financeiro.

Resumo

O comportamento crítico de sistemas que exibem magnetismo tem sido objeto de intensa pesquisa. O modelo de Heisenberg merece especial atenção por se tratar de uma ferramenta a ser empregada para a descrição das propriedades de muitos materiais magnéticos, isolantes e anisotrópicos. Além disso, sabe-se que a consideração de efeitos anisotrópicos em muitos modelos de spins pode resultar na presença de comportamento tricrítico no diagrama de fases e propriedades termodinâmicas. Em particular, a interação Dzyaloshinskii-Moriya (DM) consiste em um importante tipo de anisotropia, que desde as últimas décadas tem atraído muita atenção, desempenhando um papel relevante na descrição de algumas classes de isolantes, bem como no estudo dos fenômenos envolvendo vidro de spin, dentre outros. A presença de desordem nos modelos, introduzida através de variáveis aleatórias governadas por uma dada distribuição de probabilidades, também resulta geralmente na alteração do comportamento crítico em relação ao sistema homogêneo, de modo que tem crescido o interesse nos sistemas em presença de campo aleatório. Com tal motivação, o modelo de Heisenberg anisotrópico com interação DM e campo magnético aleatório (com distribuição trimodal) é estudado nas versões spin 1/2 e spin 1 usando o método de Oguchi (aproximação de pares). Embora a abordagem seja desenvolvida para redes com número de coordenação z geral, é tratado em detalhes o modelo na rede cúbica simples, com número de coordenação $z = 6$. O comportamento crítico, com dependência tanto do parâmetro DM quanto do campo aleatório é analisado. Os diagramas de fases investigados revelam a presença de pontos tricríticos e os resultados são estendidos à descrição do comportamento das propriedades termodinâmicas do sistema.

Palavras-chave: Modelo de Heisenberg. Interação Dzyaloshinskii-Moriya. Campo aleatório. Ponto tricrítico.

Abstract

The critical behavior of systems that exhibit magnetism has been the subject of intense research. The Heisenberg model deserves special attention because it is a tool to be used to describe the properties of many magnetic, insulators and anisotropic materials. In addition, it is known that the consideration of anisotropic effects in many spin models can result in the presence of tricritical behavior in the phase diagram and thermodynamic properties. In particular, the Dzyaloshinskii-Moriya (DM) interaction consists of an important type of anisotropy, which since the last decades has attracted a great deal of attention, playing an important role in the description of some classes of insulators, as well as in the study of the phenomena involving spin-glass, among others. The presence of disorder in the models, introduced by random variables governed by a given probability distribution, also usually results in the alteration of the critical behavior in relation to the homogeneous system. Therefore, the interest in the systems in the presence of random field has grown. With such motivation, the spin-1/2 and spin-1 anisotropic Heisenberg models with DM interaction and magnetic random field are studied within the framework of Oguchi's pair approximation. Although the approach is developed for lattices with general coordination number z the model is discussed in detail for the simple cubic lattice ($z = 6$). The critical behavior dependent on both the DM parameter and the random field is analyzed. The investigation of phase diagrams reveals the presence of tricritical points and the results are extended to describe the behavior of the thermodynamic properties of the system.

Keywords: Heisenberg model. Dzyaloshinskii-Moriya interaction. Random field. Tricritical point.

Lista de ilustrações

Figura 1	– Ilustração esquemática dos acoplamentos ferromagnético e antiferromagnético entre sítios vizinhos.	16
Figura 2	– Diagrama de fases $P \times T$ para um fluido.	16
Figura 3	– Comportamento característico do parâmetro de ordem em função da temperatura nas transições de fase: a) segunda ordem e b) primeira ordem.	18
Figura 4	– Curvas da energia livre em função do parâmetro de ordem m na teoria de Landau (esquema para uma transição contínua). As linhas são para temperaturas $T > T_c$ (—), $T = T_c$ (—) e $T < T_c$ (—).	19
Figura 5	– Curvas da energia livre em função do parâmetro de ordem m na teoria de Landau (esquema para uma transição descontínua ou de primeira ordem). Algumas linhas de temperaturas características são $T > T_c$ (—), $T = T_c$ (—) e $T < T_c$ (—).	21
Figura 6	– Representação gráfica das soluções para a equação de campo médio: $f(x) = x$ (—), $f(x) = \tanh 0,5x$ (—), $f(x) = \tanh x$ (—), $f(x) = \tanh 1,25x$ (—) e $f(x) = \tanh 2x$ (—). Os pontos nas intersecções entre as curvas da função tangente hiperbólica e a reta $f(x) = x$ representam soluções não nulas (magnetização espontânea) em temperaturas críticas abaixo de T_c	22
Figura 7	– Magnetização em função do campo magnético: comparação entre curvas com $T < T_c$, $T = T_c$ e $T > T_c$	23
Figura 8	– Magnetização em função da temperatura: solução implícita da equação de campo médio a campo nulo e para $H > 0$	23
Figura 9	– Diagrama de fases no plano $H \times T$	24
Figura 10	– Ilustração gráfica da relação $\langle e^{-x} \rangle \geq e^{-\langle x \rangle}$. A desigualdade de Gibbs-Bogoliubov provém da convexidade da função exponencial.	25
Figura 11	– Magnetização em função da temperatura reduzida: comparação entre os resultados nas aproximações de um e dois sítios.	27
Figura 12	– Diagrama de fases $k_B T_c / J \times D / J \times h$ para $p = 0$, mostrando a superfície de transição de segunda ordem, delimitada pelas linhas de pontos tricríticos.	33
Figura 13	– Diagrama de fases $k_B T_c / J \times h \times p$. As linhas contínuas com p constante correspondem às transições de segunda ordem. As transições de primeira ordem, por sua vez, são dadas pelas curvas tracejadas. Para valores de $p > p^*$, todas as transições são de segunda ordem.	35
Figura 14	– Isotermas críticas no plano $D / J \times h$ para transições de segunda ordem	36
Figura 15	– Isotermas críticas no plano $D / J \times h$ correspondentes a transições de primeira e de segunda ordem, com a presença de pontos tricríticos separando-as.	36
Figura 16	– Diagrama $k_B T_c / J \times D / J$ para valores constantes de h	37

Figura 17 – Diagrama $k_B T_c/J \times h$ para valores constantes de D/J	37
Figura 18 – Diagrama $k_B T_c/J \times D/J$ para valores constantes de Δ	38
Figura 19 – Gráfico da variação da magnetização com a temperatura para valores selecionados D/J e $\Delta = 1$	39
Figura 20 – Gráfico da variação da energia interna em função da temperatura com $\Delta = 1$, para alguns valores de D/J indicados na legenda.	40
Figura 21 – Calor específico em função da temperatura com $\Delta = 1$ para valores constantes de D/J	41
Figura 22 – Susceptibilidade magnética a campo nulo em função da temperatura com $\Delta = 1$ para valores selecionados D/J	42
Figura 23 – Diagrama de fases $k_B T_c/J \times D/J \times h$ para $p = 0$, mostrando a superfície de transição de segunda ordem, delimitada pela linha de pontos tricríticos.	45
Figura 24 – Diagrama de fases $k_B T_c/J \times h \times p$. As linhas contínuas (para cada valor constante de p) correspondem às transições de segunda ordem. As transições de primeira ordem são dadas pelas curvas tracejadas.	46
Figura 25 – Isotermas críticas no plano $D/J \times h$ mostrando as soluções de primeira e segunda ordem e os correspondentes pontos tricríticos para valores fixos de temperatura crítica.	47
Figura 26 – Diagrama $k_B T_c/J \times h$ para spin 1.	48
Figura 27 – Diagrama $k_B T_c/J \times D/J$ para spin 1.	48
Figura 28 – Diagrama de fases $k_B T_c/J \times D/J$ para valores constantes de Δ	49
Figura 29 – Magnetização em função da temperatura para valores constantes de D/J e $\Delta = 1$	50
Figura 30 – Energia interna em função da temperatura com $\Delta = 1$ para valores constantes de D/J	51
Figura 31 – Calor específico em função da temperatura com $\Delta = 1$ para valores constantes de D/J	52
Figura 32 – Susceptibilidade magnética a campo nulo para valores constantes D/J com $\Delta = 1$	53
Figura 33 – Diagrama de fases $k_B T_c/J \times D/J$ para $p = 0,1$ e $h = 1$ para diferentes valores de Δ no modelo spin 1/2.	54
Figura 34 – Diagrama de fases $k_B T_c/J \times D/J$ para $p = 0,1$ e $h = 1$ para diferentes valores de Δ no modelo spin 1.	55
Figura 35 – Representação esquemática de <i>clusters</i> com três spins nas redes: (a) kagomé ($z = 4$) e (b) triangular ($z = 6$).	57
Figura 36 – Diagrama de fases $k_B T_c/J \times D/J$ para a rede kagomé ($z = 4$).	57
Figura 37 – Diagrama de fases $k_B T_c/J \times D/J$ para a rede triangular ($z = 6$).	58

Lista de tabelas

Tabela 1 – Exemplos de transições de fase e os respectivos parâmetros de ordem [32]. .	18
Tabela 2 – Coordenadas de pontos tricríticos para valores selecionados de p para o caso spin 1/2.	35
Tabela 3 – Coordenadas de pontos tricríticos para valores selecionados de p para o caso spin 1.	47
Tabela 4 – Coordenadas dos pontos tricríticos das redes kagomé e triangular.	58

Sumário

1	Introdução	11
2	Fundamentação Teórica	14
2.1	Modelos magnéticos	14
2.2	Transições de fase	16
2.2.1	Teoria de Landau	17
2.2.1.1	Pontos tricríticos	20
2.3	Métodos aproximativos	21
2.3.1	Abordagem clássica de Weiss	21
2.3.2	Minimização da energia livre: princípio variacional	24
2.4	Interação Dzyaloshinskii-Moriya e campo aleatório	27
3	Resultados e Discussões	30
3.1	Modelo de Heisenberg spin 1/2 com interação DM e campo magnético aleatório	30
3.1.1	Diagramas de fases	33
3.1.2	Caso $p = 1$	38
3.2	Modelo de Heisenberg spin 1 com interação DM e campo magnético aleatório	43
3.2.1	Diagramas de fases	45
3.2.2	Caso $p = 1$	49
3.3	Considerações finais	54
3.3.1	Modelo de Heisenberg com anisotropia de campo cristalino	55
4	Conclusões	60
	Referências	62
	Apêndices	67
	APÊNDICE A Produto de Kronecker e matrizes de spins	68
	APÊNDICE B Média configuracional da magnetização e energia livre	71
	APÊNDICE C Coeficientes da expansão de Landau	73

1

Introdução

O estudo das propriedades magnéticas dos sólidos é o domínio da Física cujo interesse consiste na descrição da interação dos momentos magnéticos das partículas que compõem a matéria [1]. A descrição de tais propriedades é de grande relevância, uma vez que possuem muitas vantagens relacionadas a aplicações em novas tecnologias. Por isso, diversas abordagens, tanto teóricas quanto experimentais, têm sido elaboradas ao longo dos anos em busca de maior compreensão dos fenômenos que exibem magnetismo.

Estudos teóricos analítico-computacionais utilizando modelos magnéticos são uma grande motivação, uma vez que podem, paralelamente às abordagens experimentais, explicar muitos fenômenos ou servir como um primeiro ponto de vista para a elucidação de determinado tipo de comportamento. Por outro lado, diversas técnicas teóricas aproximativas têm sido utilizadas para tratar as abordagens estatísticas e termodinâmicas dos mais variados modelos, buscando reproduzir resultados experimentais ou propor novas ideias e perspectivas de pesquisa. Desse modo, o desenvolvimento de pesquisas ligadas à descrição das propriedades magnéticas dos materiais tem se tornado cada vez mais intenso, alcançando grandes avanços ao longo das últimas décadas [2,3].

Nos modelos magnéticos, uma componente de grande relevância é a constante de interação (também chamada de “troca”, do inglês *exchange*), denotada por J , que tem o papel de descrever as interações entre os átomos, componentes elementares dos materiais [2,4]. De maneira simplificada, as partículas do sistema podem ser tratadas como spins¹ apontando em uma dada direção e ocupando os sítios (posições bem definidas) de uma determinada rede cristalina [3].

Dependendo dos tipos de átomos envolvidos e do ambiente no qual eles se encontram,

¹ O spin é um ente de natureza essencialmente quântica e pode ser entendido (por analogia clássica) como o momento angular intrínseco de uma dada partícula [2]. No caso do magnetismo consiste basicamente no momento magnético associado ao elétron (além do momento magnético orbital). Ou seja, em essência, as propriedades magnéticas macroscópicas dos materiais são uma consequência direta das interações entre os momentos magnéticos de seus átomos constituintes. Estatisticamente, cada spin interage com os demais, sendo que em uma modelagem a interação é geralmente considerada para o caso de sítios vizinhos e pode ser desprezada para os mais distantes.

a interação de troca nos modelos de spins pode apresentar muitas variações. Alguns exemplos destas variações são [3,5]: Heisenberg ($J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$), Ising ($JS_1^z S_2^z$), anisotrópica (uma combinação destas últimas, como no caso $J[\Delta S_1^z S_2^z + (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y)]$), biquadrática ($J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^2$), entre outras. Além disso, podem existir no Hamiltoniano outros termos que não são interações, mas que envolvem spins individuais, como é o caso de termos de campo cristalino, tipicamente na forma $A(S_1^z)^2$, e campo magnético externo na forma HS_1^z [6]. Todas estas situações descrevem casos particulares e extensões ou generalizações do modelo de Heisenberg, quando em adição à interação de troca isotrópica, outros efeitos desempenham papel relevante.

O estudo de sistemas que exibem magnetismo possui características bastante peculiares e vários fenômenos e comportamentos são observados. Dentre eles, estão os aspectos inerentes das transições de fase [7,8], correspondendo geralmente a uma mudança qualitativa e quantitativa nas propriedades macroscópicas de um dado material. Usualmente o conceito é associado a uma mudança na variável denominada de parâmetro de ordem [9]. Tais mudanças (transições) ocorrem quando uma fase termodinâmica torna-se instável em determinadas condições. Uma mudança de estado pode envolver ou não um calor latente. As fases antes e depois de uma transição muitas vezes têm diferentes simetrias. A fase de alta temperatura é geralmente mais simétrica do que a fase de baixa temperatura [6]. Por isso, quando ocorre transição normalmente fala-se em quebra de simetria [6].

O formalismo adotado para a descrição das transições de fase baseia-se na Termodinâmica [7–9]. Um material pode se apresentar em várias fases sob determinadas condições das variáveis termodinâmicas envolvidas, como a temperatura, o volume e a pressão, e mudar de uma fase para outra quando tais condições são modificadas [10]. Basicamente o que caracteriza uma transição é a mudança qualitativa das propriedades provocada a partir de variações de grandezas termodinâmicas envolvidas no sistema. Sabe-se, por exemplo, que à pressão ambiente (a nível do mar), a água começará a ferver ao atingir aproximadamente 100°C . Outro caso interessante acontece no fenômeno conhecido por “cavitação” [11], em que se observa a formação de bolhas de vapor (gás) num líquido por efeito de uma redução da pressão total. Essa ocorrência pode ser verificada no funcionamento de um submarino. Pelo princípio de Bernoulli, o girar das hélices faz com que a pressão local do fluido no entorno das mesmas seja reduzida, ocasionando as bolhas pela vaporização da água. Manter-se oculto, portanto, é uma tarefa de estratégia para a engenharia militar.

A visão moderna das transições de fase está intrinsecamente relacionada à noção de parâmetro de ordem do sistema. Para descrever as transições de fase com uma mudança de simetria, Landau introduziu este conceito (no caso de sistemas magnéticos, a magnetização m). É notável que o domínio das transições de fase possui, ao mesmo tempo, uma diversidade abundante e extremamente rica, além de muitas propriedades comuns tornando-se imprescindível a necessidade de classificá-las. Assim, transições de fases de segunda ordem são aquelas para as quais o parâmetro de ordem permanece contínuo à medida que ocorre a transição. Este é

usualmente um caso mais simples de se analisar. As transições de primeira ordem, por sua vez, são aquelas para as quais o parâmetro de ordem é descontínuo na transição e o estudo deste tipo de comportamento geralmente envolve a análise da energia livre do sistema [10].

Ao longo dos anos, o estudo de sistemas que exibem magnetismo tem despertado o interesse de pesquisadores e, conseqüentemente, aumentado o entusiasmo em relação aos efeitos de diferentes anisotropias sobre o comportamento crítico de diversos modelos, a exemplo do modelo de Heisenberg. Duas das anisotropias mais discutidas são a de campo cristalino (íon único) [12, 13] e Dzyaloshinskii-Moriya [14, 15]. Os modelos abordados são de variados tipos de spin ($S = 1/2$, $S = 1$, $S = 3/2$, mistos, dentre outros).

Especificamente para o modelo de Heisenberg spin $1/2$, uma prova rigorosa conhecida como teorema de Mermin-Wagner [16] proíbe um ordenamento espontâneo de longo alcance para o caso isotrópico em uma e duas dimensões. Desse modo, pode aparecer ordem espontânea apenas se for considerada uma estrutura magnética tridimensional ou alguma anisotropia magnética envolvida. Para spins maiores, contudo, não há tal restrição, uma vez que Stanley e Kaplan [17] mostraram a existência de transição de fase no modelo de Heisenberg ferromagnético para $S > 1/2$ em duas e três dimensões.

O estudo desenvolvido na presente dissertação trata das propriedades críticas do modelo de Heisenberg ferromagnético para os casos spin $1/2$ e spin 1 com interações anisotrópicas de troca e Dzyaloshinskii-Moriya e na presença de campo magnético aleatório, utilizando uma distribuição de probabilidades conhecida como “trimodal” [18–21]. O texto dissertativo se constitui da seguinte maneira: no Capítulo 2 é feita uma abordagem geral a respeito de modelos e formalismos, bem como das técnicas aproximativas que serão empregadas para a obtenção de resultados. No Capítulo 3 são mostrados os resultados para o modelo spin $1/2$ contidos na Seção 3.1, onde são investigados os diagramas de fases. As propriedades termodinâmicas na ausência de campo são também obtidas, reproduzindo-se os resultados de Sousa et al. [22]. O caso do modelo com spin 1 é abordado na Seção 3.2, detalhando-se mais uma vez o comportamento crítico do sistema. Neste caso, o modelo na ausência de campo retoma o comportamento investigado por Sun e Kong [14]. Finalmente, a Seção 3.3 descreve discussões sucintas de alguns modelos e métodos relacionados. As conclusões e perspectivas são tratadas no Capítulo 4. Por fim, os Apêndices descrevem com maior rigor alguns detalhes matemáticos dos cálculos envolvidos.

2

Fundamentação Teórica

Neste capítulo desenvolve-se, a título de revisão, alguns modelos e métodos utilizados para o estudo de sistemas interagentes. Os detalhes de todas as possíveis interações de muitos corpos não são levados em conta no tratamento. Mesmo assim, as interações incluídas de forma simplificada tornam possível descrever a essência física de sistemas interagentes, possibilitando, inclusive, soluções analíticas exatas para alguns casos [23]. Quando as soluções se tornam muito complicadas para um tratamento analítico exato, formalismos de aproximações tais como as teorias de campo médio [9, 23] e campo efetivo [24, 25] são, em muitos casos, de grande utilidade e fornecem primeiros indícios de observações físicas importantes. Ocasionalmente, recursos de simulação numérica, a exemplo do método de Monte Carlo [26], são também uma vantajosa ferramenta na estimativa de resultados, mas não serão abordados no presente trabalho.

2.1 Modelos magnéticos

Modelos magnéticos têm sido apresentados na literatura com o propósito de descrever os aspectos inerentes de comportamentos observados por alguns sistemas que apresentam efeitos cooperativos. Exemplos de modelos largamente aplicados ao caso de magnetismo localizado são Ising e Heisenberg. Muitas variantes destes têm se destacado ao longo dos anos, a exemplo dos modelos de Blume-Capel [27, 28], Potts [29], XY [30], dentre outros, sendo algumas dessas variantes mais específicas para tratar sistemas que, por algum aspecto, se destacam por apresentar características pouco usuais ou mesmo efeitos mais robustos, tais como transição de primeira ordem e pontos multicríticos. É nesse aspecto que se distingue o modelo de Heisenberg em presença da interação Dzyaloshinskii-Moriya, o qual tem fornecido resultados teóricos que corroboram com dados experimentais [31].

Macroscopicamente, um cristal magnético consiste num arranjo muito grande de átomos. Assim, uma aproximação bastante simples, mas de considerável precisão para muitos casos, consiste em assumir que apenas os vizinhos mais próximos interagem com um dando sítio (ponto da rede). O número de primeiros vizinhos numa rede cristalina é chamado de número de

coordenação, usualmente representado pelas letras z (como nesta dissertação) ou q . Os arranjos possíveis que são tratados nos modelos vão desde o caso unidimensional (uma cadeia de spins), passando por estruturas bidimensionais, como as redes quadrada e hexagonal, até o caso 3D, cujo exemplo mais simples é a chamada rede cúbica simples.

O estudo teórico dos fenômenos críticos baseia-se, de modo geral, em modelos que procuram se adequar à descrição de materiais através de seus constituintes microscópicos. No caso do magnetismo, o momento magnético intrínseco do elétron, bem conhecido como spin, é o elemento que desempenha o papel fundamental na descrição dos fenômenos.

Usando o formalismo do magnetismo, em que a energia do sistema é descrita em termos de variáveis de spins, uma das muitas formulações possíveis que podem ser apresentadas para um modelo é a seguinte:

$$\mathcal{H} = -\sum_{i,j} J_{ij} \left[\alpha (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + \beta S_i^z S_j^z \right] \quad (2.1)$$

A partir da relação (2.1) podem ser definidos três dos modelos mais utilizados nos estudos dos fenômenos magnéticos:

- $\alpha = \beta = 1 \rightarrow$ Heisenberg;
- $\alpha = 1, \beta = 0 \rightarrow$ XY;
- $\alpha = 0, \beta = 1 \rightarrow$ Ising;

Em essência, qualquer modelo está associado ao tipo de spin e à estrutura da rede (incluindo a dimensão). Em relação ao tipo do spin podemos ter, por exemplo, $S = \pm 1$ (Ising), $\vec{S} = (S^x, S^y)$ (XY) e $\vec{S} = (S^x, S^y, S^z)$ (Heisenberg). Em relação à estrutura, exemplos são as redes cúbica simples, cúbica de corpo centrado (3D), triangular, quadrada (2D), dentre outras.

Considerando o caso mais simples possível (Ising), para uma rede de N spins o modelo é usualmente definido por:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i, \quad (2.2)$$

onde a primeira soma é efetuada sobre os vizinhos mais próximos, o que é denotado por $\langle i, j \rangle$, enquanto a segunda descreve o campo externo atuando sobre cada sítio i da rede (interação Zeeman). H aqui já inclui o momento magnético μ de cada spin (está em unidades de energia). J é a constante de troca ou *exchange* e $\sigma_{i(j)}$ são variáveis de spin, assumindo, neste caso, dois estados possíveis, $+1$ e -1 (modelo binário).

Diferente de um caso clássico como o gás ideal, por exemplo, onde são desprezadas todas as interações entre moléculas, aqui os sítios vizinhos na rede interagem. O acoplamento J que surge desta interação tem o sinal dependente da forma como os sítios mais próximos se alinham. Isto é o que define os casos de ferromagnetismo e antiferromagnetismo no modelo:

$J_{\uparrow\uparrow} = J_{\downarrow\downarrow} = J$, $J_{\uparrow\downarrow} = -J$. As setas indicam a orientação do spin: *up* (\uparrow) e *down* (\downarrow). O esquema é ilustrado na Fig. 1.

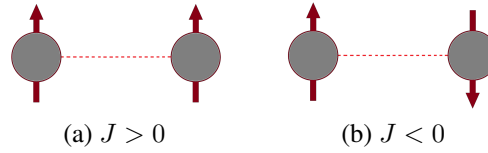


Figura 1 – Ilustração esquemática dos acoplamentos ferromagnético e antiferromagnético entre sítios vizinhos.

2.2 Transições de fase

O fenômeno das transições de fases ocupa um importante lugar na Física da Matéria Condensada, por razões tais como a frequência e diversidade com que ocorre nos sistemas físicos, despertando grande motivação e interesse na descrição e entendimento do comportamento crítico e explicação de questões conceituais relacionadas. As transições de fase em fluidos e ferromagnetos fornecem dois exemplos de uma grande diversidade de mudanças de estado.

O exemplo bem conhecido cotidianamente que envolve transição é da água e suas várias fases: sólido (gelo), líquido, gás (vapor). As transições de uma fase para outra, neste caso, podem ser facilmente observadas e já nos são muito familiares, uma vez que podemos distingui-las na experiência diária.

Para um determinado sistema, um conjunto de parâmetros (temperatura, pressão, campo externo, entre outros) são variados para destacar as várias fases do sistema e explorar os domínios de existência de cada uma. Os resultados são registrados pela determinação do chamado diagrama de fases. Como exemplo, é mostrado na Fig. 2 o diagrama pressão vs. temperatura para um fluido simples.

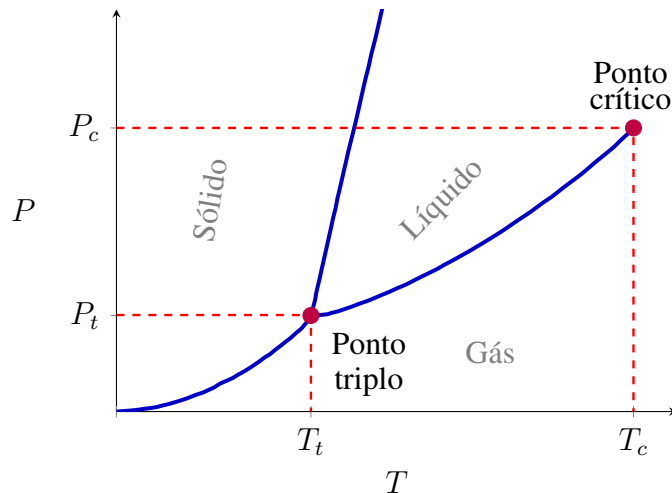


Figura 2 – Diagrama de fases $P \times T$ para um fluido.

Este diagrama mostra os domínios de existência de três fases (sólido, líquido, gás) para um fluido. Existem dois pontos particulares: o ponto triplo (P_t, T_t) na junção dos três domínios e o ponto crítico (P_c, T_c), ponto final na fronteira entre os domínios das fases líquida e gasosa. Ao contornar ao redor do ponto crítico pode-se passar continuamente de um estado líquido para um estado gasoso (sem transição descontínua).

Conforme já discutido, as transições de fase geralmente são caracterizadas por singularidades termodinâmicas. Com a evolução histórica da Termodinâmica e da Física Estatística, várias maneiras de discutir essas singularidades foram propostas ao longo do tempo. Naturalmente, as diferentes classificações refletem a evolução conceitual dos métodos de estudo de transição de fase.

A classificação mais antiga, de natureza termodinâmica, é devida a Ehrenfest. Baseia-se na análise de singularidades do potencial termodinâmico associado. Posteriormente, Landau trouxe a noção de quebra de simetria espontânea, o que corresponde a uma classificação diferente, com base no parâmetro de ordem do sistema considerado.

2.2.1 Teoria de Landau

Baseada essencialmente em considerações de simetria, a teoria de Landau fornece uma descrição aproximada do comportamento do sistema próximo a uma transição de fase. Esta abordagem fenomenológica relaciona quantidades mensuráveis entre si usando um conjunto mínimo de parâmetros de entrada que podem ser determinados por comparação à experiência ou a partir de abordagens de primeiros princípios. A teoria de Landau pode então servir como uma ponte conceitual entre os modelos microscópicos e os fenômenos macroscópicos observados.

De forma resumida, a proposta de Landau consiste numa análise baseada na simetria do sistema, que busca descrever o comportamento de equilíbrio na vizinhança da criticalidade. É um fato notável que um sistema não pode mudar suavemente entre duas fases de diferentes simetrias. O caminho contínuo que um sistema fluido pode tomar entre os estados líquido e gasoso em torno do ponto crítico é possível apenas porque não há mudança de simetria envolvida. Além disso, os estados termodinâmicos de duas fases que são simetricamente distintas devem ser os mesmos na linha de transição por eles compartilhada (a chamada linha de coexistência de fases), de tal forma que a simetria de uma fase deve ser maior do que a da outra.

Landau então caracterizou a transição em termos de um parâmetro de ordem, uma quantidade física que geralmente é nula na fase de alta simetria (desordenada), e muda para um valor finito uma vez que ocorre a quebra da simetria (fase ordenada). Essa mudança pode ser contínua ou descontínua, o que corresponde a transições de segunda ordem e primeira ordem, respectivamente.

Graficamente, o comportamento do parâmetro de ordem nas transições contínuas e

descontínuas é apresentado na Fig. 3. Alguns tipos de parâmetros de ordem para diferentes transições de fase são mostrados na Tab. 1.

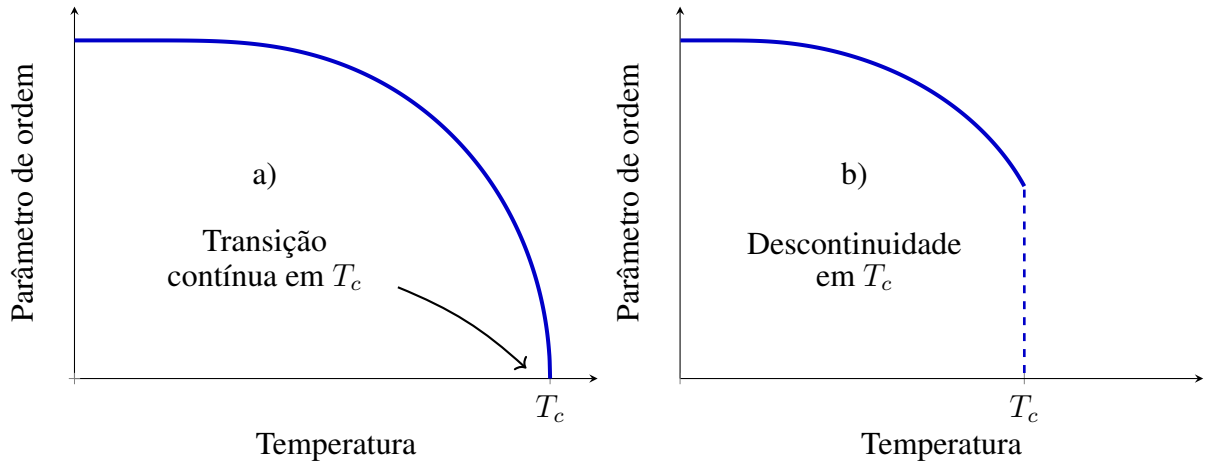


Figura 3 – Comportamento característico do parâmetro de ordem em função da temperatura nas transições de fase: a) segunda ordem e b) primeira ordem.

Tabela 1 – Exemplos de transições de fase e os respectivos parâmetros de ordem [32].

Transição de fase	Parâmetro de ordem	Exemplos
Paramagnética-ferromagnética	Magnetização m	Fe, Ni
Paraelétrica-ferroelétrica	Polarização p	BaTiO ₃ , BiFeO ₃
Paramagnética-antiferromagnética	Magnetização alternada (<i>staggered</i>) $m_s = m_A - m_B$	RbMnF ₃
Gás-líquido	Densidade $\rho - \rho_c$	CO ₂ , H ₂ O

A essência da abordagem de Landau se dá do fato de que a energia livre pode ser representada como uma expansão em série de potências do parâmetro de ordem na vizinhança da transição:

Para o caso do magnetismo, no qual o parâmetro de ordem é a magnetização m :

$$F(T, m) = F_0(T) + a(T)m^2 + b(T)m^4 \quad (2.3)$$

Por questões de simetria, é notável o fato de que a energia livre não deve depender do sinal de m , ou seja, $F(T, m) = F(T, -m)$, de modo que apenas potências pares devem aparecer na expansão.

A dependência de a com relação à temperatura é considerada de tal forma que para $T > T_c$ ou $T = T_c$ a energia livre será minimizada apenas para $m = 0$, enquanto que abaixo de T_c a energia será mínima para $|m| > 0$ ¹.

¹ O que garante que F será mínima são as condições $(\partial F / \partial m)_T = 0$ e $(\partial^2 F / \partial m^2)_T \geq 0$ para o equilíbrio. Isto assegura que $b > 0$ para equilíbrio mais estável (graficamente, um mínimo global).

Se $a > 0$ para $T > T_c$ e $a < 0$ para $T < T_c$, então a energia livre será mínima em $m = 0$ quando $T > T_c$ em $m \neq 0$ quando $T < T_c$. E o ponto crítico (em $T = T_c$) ocorre quando $a(T_c) = 0$, uma vez que F deve variar continuamente na região de transição. Com isto, escreve-se que:

$$a = \alpha(T - T_c), \quad \alpha > 0 \quad (2.4)$$

Minimizando com relação a m , energia livre tem extremos:

$$m = 0 \quad \text{ou} \quad m = \pm \sqrt{\frac{-a}{2b}} = \pm \sqrt{\frac{\alpha}{2b}(T_c - T)} \quad (2.5)$$

Quando $T > T_c$, o mínimo ocorre para $m = 0$. Já quando $T < T_c$, o mínimo se dá para $m = \pm \sqrt{(\alpha/2b)(T_c - T)}$. Dessa forma, abaixo de T_c o parâmetro de ordem é não nulo e cresce proporcional a $(T_c - T)^{1/2}$.

Assim, pode-se expressar a energia livre da seguinte maneira:

$$F(T, m) = F_0 \quad \text{para} \quad T > T_c, \quad (2.6)$$

$$F(T, m) = F_0 - \frac{\alpha^2(T_c - T)^2}{4b} \quad \text{para} \quad T < T_c \quad (2.7)$$

Na Fig. 4 é esquematizado o comportamento da energia livre para o caso de uma transição de fase de segunda ordem. Acima de T_c há um mínimo global da energia livre em $m = 0$. Em T_c , o gráfico torna-se mais achatado na vizinhança de $m = 0$ e, finalmente, em $T < T_c$ passam a existir dois mínimos simétricos da energia livre, cujas posições dão novos valores finitos do parâmetro de ordem $\pm m_0$, enquanto $m = 0$ passa a ser um máximo local.

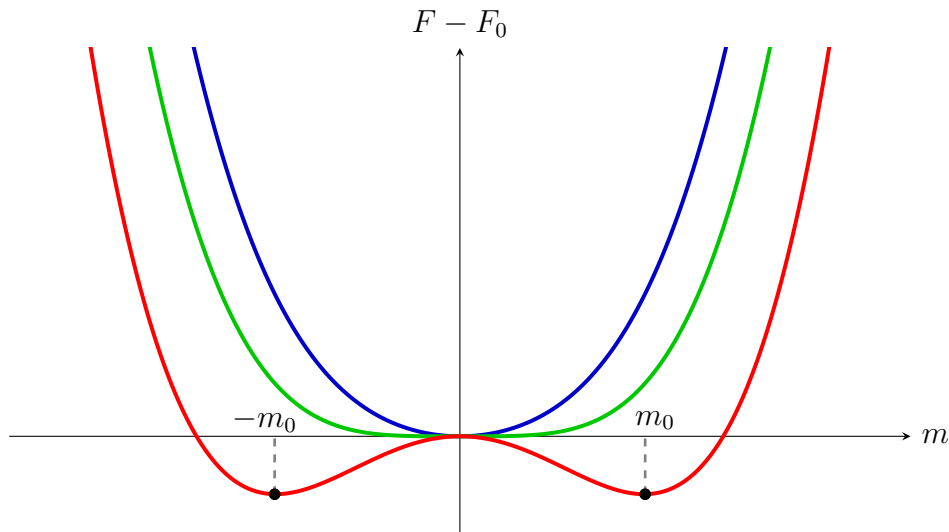


Figura 4 – Curvas da energia livre em função do parâmetro de ordem m na teoria de Landau (esquema para uma transição contínua). As linhas são para temperaturas $T > T_c$ (—), $T = T_c$ (—) e $T < T_c$ (—).

2.2.1.1 Pontos tricríticos

A teoria de Landau permite também descrever um ponto tricrítico (ponto em que uma linha de pontos de transição de segunda ordem toca uma linha de transição descontínua). Para isso, considera-se a expressão da energia livre na forma:

$$F(m, T) = F_0(T) + a(T)m^2 + b(T)m^4 + c(T)m^6 + \dots \quad (2.8)$$

Os extremos da energia livre descrita em (2.8) são dados por:

$$\left. \frac{\partial F}{\partial m} \right|_T = 2am + 4bm^3 + 6cm^5 = 0, \quad (2.9)$$

cujas soluções são:

$$m = 0 \quad \text{ou} \quad m^2 = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 3ac}}{3c} \quad (2.10)$$

Nesta situação pode-se ter dois regimes: uma linha de transições de fase contínuas e uma de transições descontínuas. As condições que devem satisfazer uma transição descontínua ou de primeira ordem são $F = F_0$ e $(\partial F / \partial m)_T = 0$. Essas equações simultaneamente resolvidas fornecem:

$$m^2 = \frac{-b}{2c}, \quad (2.11)$$

de modo que para $m^2 > 0$ exige-se $b < 0$, e

$$a = \frac{b^2}{4c}, \quad (2.12)$$

que determina a linha de transição de primeira ordem. Já para a transição de segunda ordem tem-se a condição $a = 0$.

Na Fig. 5 é apresentado o comportamento da energia livre na região de transição de primeira ordem.

As linhas começam com temperaturas acima de T_c , onde o sistema encontra-se na fase desordenada, pois F tem apenas um mínimo em $m = 0$. As temperaturas vão decrescendo até $T = T_c$, que corresponde à temperatura para a qual ocorre transição de primeira ordem, quando os mínimos da energia livre $m \neq 0$ são iguais ao mínimo $m = 0$. Neste ponto, as fases ordenada e desordenada coexistem. Para $T < T_c$, o mínimo global $m \neq 0$ garante a estabilidade do sistema na fase ordenada. Vale observar ainda que para temperaturas um pouco acima da transição de primeira ordem aparecem mínimos locais, que representam a situação de metaestabilidade da fase ordenada (o equilíbrio se dá na fase desordenada, pois $m = 0$ é mínimo global).

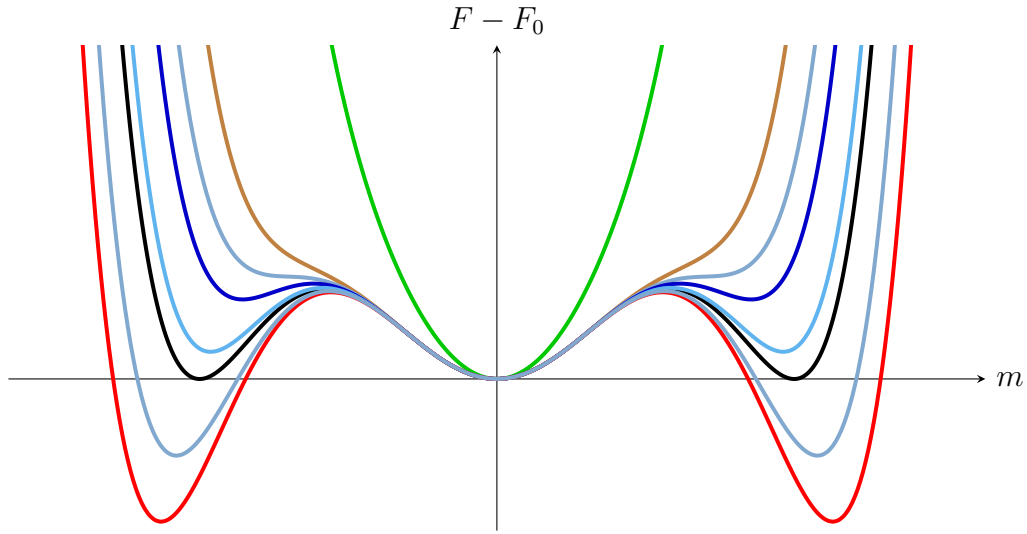


Figura 5 – Curvas da energia livre em função do parâmetro de ordem m na teoria de Landau (esquema para uma transição descontínua ou de primeira ordem). Algumas linhas de temperaturas características são $T > T_c$ (—), $T = T_c$ (—) e $T < T_c$ (—).

2.3 Métodos aproximativos

A seguir é elaborada uma descrição dos procedimentos de cálculos baseados na aproximação de campo molecular (campo médio), que frequentemente é utilizada devido a sua simplicidade como ferramenta primária para a estimativa do comportamento magnético de muitos sistemas de spins. A abordagem quantitativa de campo médio é capaz de determinar as temperaturas críticas e fornecer também estimativas dos expoentes críticos [33]. Quando se trata de modelagem magnética, muitas situações representam uma série de desafios em relação a métodos analíticos mais sofisticados, de modo que a versatilidade e simplicidade conceitual são vantagens desta aproximação, que pode ser facilmente adaptada a modelos de spins em diversas redes cristalinas [23].

2.3.1 Abordagem clássica de Weiss

Para uma ilustração do formalismo, consideremos o caso mais simples, a aproximação de campo médio (equivalente a tomar um *cluster* de apenas um sítio) aplicada ao modelo de Ising:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i, \quad \sigma_i = \pm 1 \quad (2.13)$$

O campo médio sugerido por Weiss simplesmente troca a interação spin-spin por um campo magnético médio no qual o spin deve estar situado. Este campo deve ser proporcional à magnetização:

$$\gamma = J \sum_{i=1}^z \sigma_i = Jzm,$$

em que z é o número de coordenação e m é a magnetização por spin.

Portanto, o Hamiltoniano de campo médio para um spin é dado por:

$$\mathcal{H}_1 = -\sigma_1 \left(J \sum_{j=1}^z \sigma_j + H \right) = -(Jzm + H)\sigma_1 \quad (2.14)$$

onde σ_1 é o spin do *cluster* considerado. Neste caso, os detalhes da estrutura são perdidos a partir desta aproximação, uma vez que somente z não fornece precisamente a topologia tratada. O que não ocorre com a teoria de campo efetivo, usando a técnica do operador diferencial, uma outra ferramenta possível para esta abordagem.

Tomando agora a média termodinâmica $\langle \sigma_1 \rangle \equiv m$, teremos:

$$m = \frac{\sum_{\{\sigma_1\}} \sigma_1 e^{(Kzm+h)\sigma_1}}{\sum_{\{\sigma_1\}} e^{(Kzm+h)\sigma_1}} = \frac{e^{Kzm+h} - e^{-Kzm-h}}{e^{Kzm+h} + e^{-Kzm-h}}, \quad (2.15)$$

sendo $K = \beta J$ e $h = \beta H$.

Lembrando das funções hiperbólicas²:

$$m = \frac{\sinh(Kzm + h)}{\cosh(Kzm + h)}$$

$$m = \tanh(Kzm + h) \quad (2.16)$$

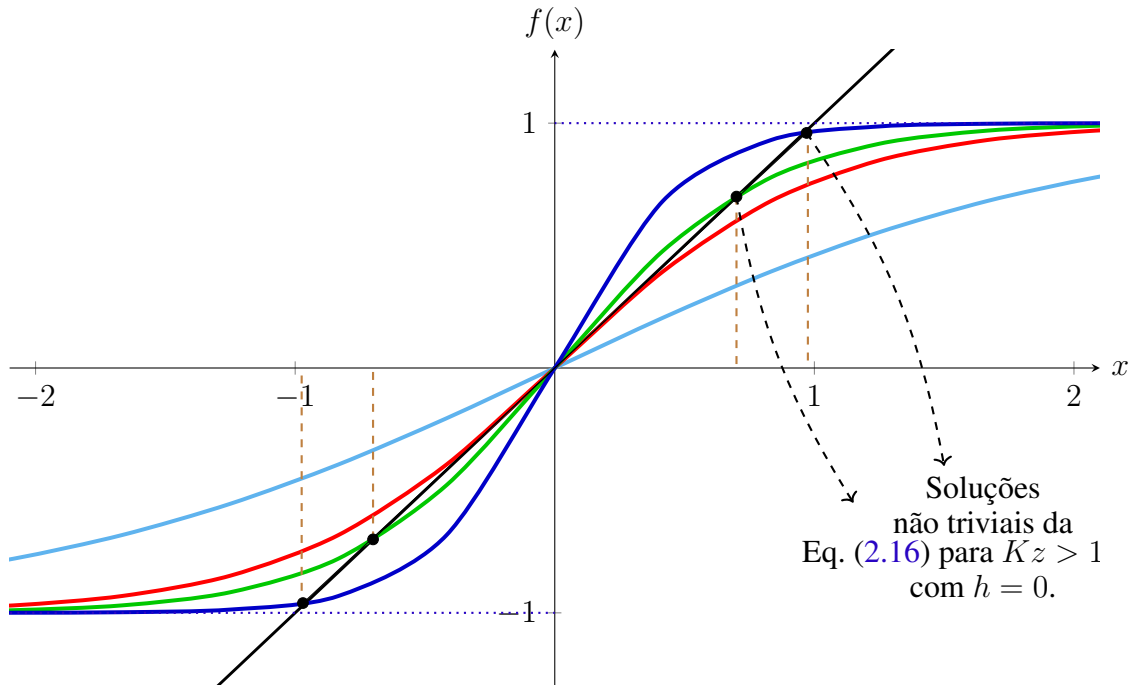


Figura 6 – Representação gráfica das soluções para a equação de campo médio: $f(x) = x$ (—), $f(x) = \tanh 0,5x$ (—), $f(x) = \tanh x$ (—), $f(x) = \tanh 1,25x$ (—) e $f(x) = \tanh 2x$ (—). Os pontos nas intersecções entre as curvas da função tangente hiperbólica e a reta $f(x) = x$ representam soluções não nulas (magnetização espontânea) em temperaturas críticas abaixo de T_c .

² $\sinh x = \frac{1}{2}(e^x - e^{-x})$, $\cosh x = \frac{1}{2}(e^x + e^{-x})$ e $\tanh x = \sinh x / \cosh x$.

O resultado mostrado na Eq. (2.16) é a famosa relação da teoria de Weiss, a aproximação de campo médio clássica. Plotando-se m e $\tanh(Kzm)$ ($h = 0$, ver Fig. 6) pode-se perceber que há sempre uma intersecção em 0 (solução trivial). Se $Kz < 1$, ou seja, $T > Kz \equiv T_c$, a inclinação da tangente hiperbólica na origem é menor do que 1 e há somente a solução $m = 0$. Por outro lado, se $Kz > 1$ ou $T < T_c$ ocorrem três soluções: $m = 0$ e $m = \pm m_0 \neq 0$.

Na Fig. 7 é apresentado o diagrama $m \times h$, enquanto o comportamento da magnetização em relação à temperatura pode ser visto na Fig. 8.

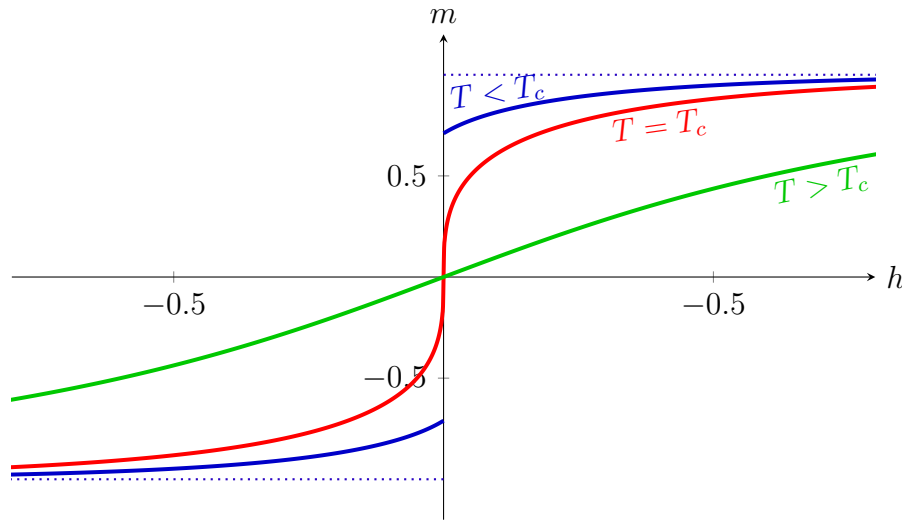


Figura 7 – Magnetização em função do campo magnético: comparação entre curvas com $T < T_c$, $T = T_c$ e $T > T_c$.

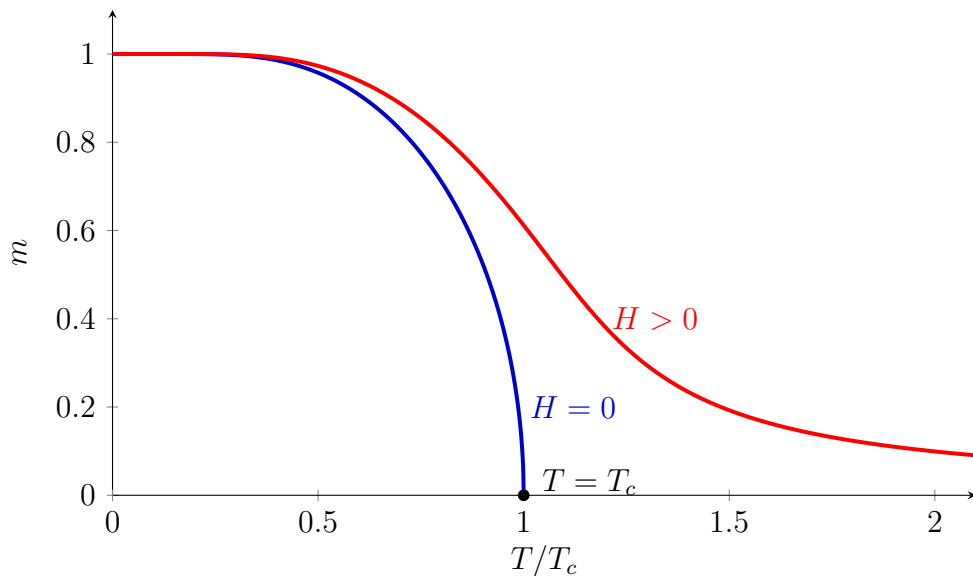


Figura 8 – Magnetização em função da temperatura: solução implícita da equação de campo médio a campo nulo e para $H > 0$.

O diagrama $H \times T$ é mostrado na Fig. 9 para um material que apresenta transição ferromagnética (ferromagneto uniaxial). Este diagrama mostra um ponto limite no eixo T com

$H = 0$, o chamado ponto crítico. A campo nulo, quando $T = T_c$, no ponto crítico ocorre uma transição. Acima de T_c há uma fase desordenada, paramagnética, sem magnetização espontânea; enquanto abaixo de T_c existe magnetização espontânea e observa-se uma fase ordenada, chamada ferromagnética. Pode-se fazer uma analogia com a transição líquido-gás no diagrama $P \times T$, com H desempenhando papel análogo a P .

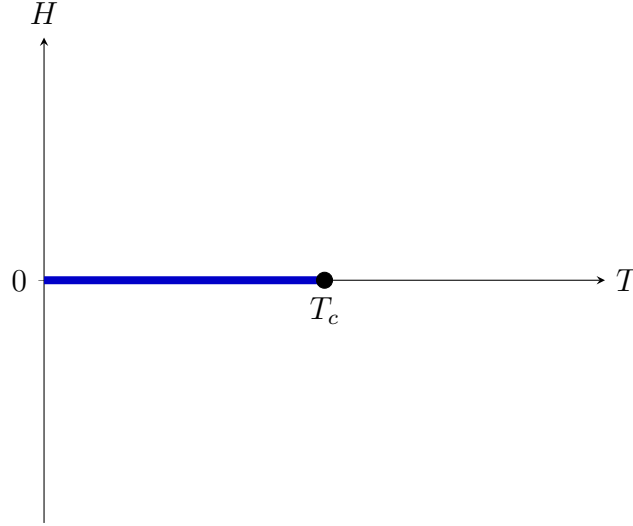


Figura 9 – Diagrama de fases no plano $H \times T$.

A aproximação de campo médio pode ser obtida também através da aplicação do princípio variacional [9], uma aproximação da energia livre, que será mostrado na próxima seção para o caso de dois sítios. A aproximação de pares é mais conhecida como método de Oguchi [22, 34].

2.3.2 Minimização da energia livre: princípio variacional

O método baseia-se na desigualdade de Gibbs-Bogoliubov [23], que é a base formal da teoria de campo médio:

$$F \leq \Phi \equiv F_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0, \quad (2.17)$$

onde F é a energia livre do sistema descrito por um Hamiltoniano \mathcal{H} (exato), F_0 é a energia livre associada ao sistema simplificado, dado pelo Hamiltoniano \mathcal{H}_0 (aproximado) e $\langle \cdots \rangle_0$ denota a média tomada na aproximação dada por \mathcal{H}_0 .

Seja um sistema dado por um Hamiltoniano \mathcal{H} . A energia livre correspondente é definida por:

$$F = -k_B T \ln Z, \quad (2.18)$$

onde Z é a função de partição canônica do sistema:

$$Z = \sum_{\{s\}} e^{-\beta \mathcal{H}\{s\}}, \quad (2.19)$$

cujasoma é realizada sobre todas as configurações de spins (caso magnético). F é a verdadeira energia livre do sistema, sem aproximações.

Considerando agora que:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1, \quad (2.20)$$

onde a decomposição é tomada de tal modo que a estatística de \mathcal{H}_0 possa ser calculada de maneira mais fácil, pois é a aproximação considerada, enquanto \mathcal{H}_1 contém toda a parte restante de \mathcal{H} , sendo de difícil tratamento.

Assim, aplicando (2.20) em (2.19), temos:

$$Z = \sum e^{-\beta\mathcal{H}} = \sum e^{-\beta\mathcal{H}_1 - \beta\mathcal{H}_0} = \sum e^{-\beta\mathcal{H}_1} e^{-\beta\mathcal{H}_0} \quad (2.21)$$

Dividindo ambos os membros por Z_0 , teremos:

$$\frac{Z}{Z_0} = \frac{\sum e^{-\beta\mathcal{H}_1} e^{-\beta\mathcal{H}_0}}{\sum e^{-\beta\mathcal{H}_0}} = \langle e^{-\beta\mathcal{H}_1} \rangle_0 \quad (2.22)$$

Pela propriedade de convexidade³ da função $f(x) = e^{-x}$ (ver Fig. 10) é obtida a relação:

$$\langle e^{-\beta\mathcal{H}_1} \rangle_0 \geq e^{-\beta\langle\mathcal{H}_1\rangle_0} \quad (2.23)$$

Com a desigualdade (2.23) segue então de (2.22) que:

$$\frac{Z}{Z_0} \geq e^{-\beta\langle\mathcal{H}_1\rangle_0} \quad \text{ou} \quad \ln Z - \ln Z_0 \geq -\beta\langle\mathcal{H}_1\rangle_0 \quad (2.24)$$

Uma vez que $F = -\frac{1}{\beta} \ln Z$, $F_0 = -\frac{1}{\beta} \ln Z_0$ e $\langle\mathcal{H}_1\rangle_0 = \langle\mathcal{H} - \mathcal{H}_0\rangle_0$, prova-se imediatamente a relação (2.17):

$$F \leq F_0 + \langle\mathcal{H} - \mathcal{H}_0\rangle_0 \quad (2.25)$$

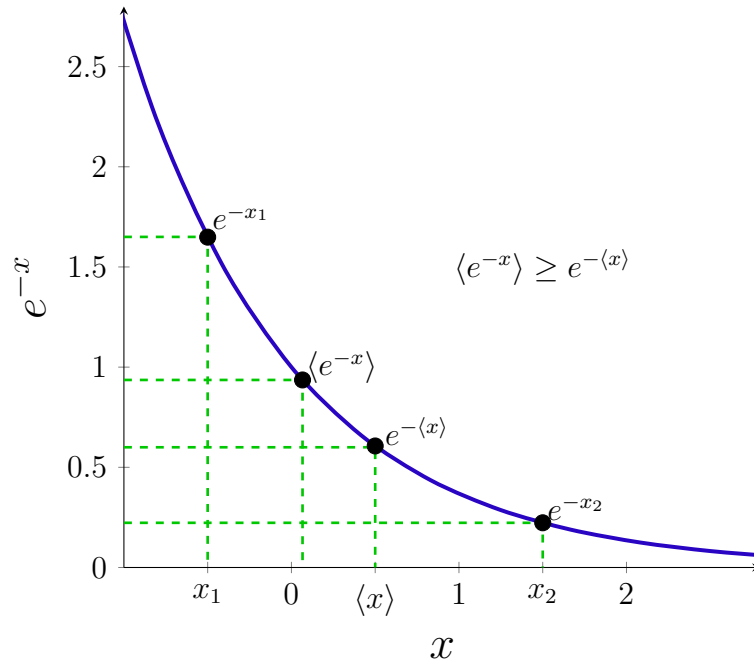


Figura 10 – Ilustração gráfica da relação $\langle e^{-x} \rangle \geq e^{-\langle x \rangle}$. A desigualdade de Gibbs-Bogoliubov provém da convexidade da função exponencial.

³ Uma função $f(x)$ é convexa se $f\left(\frac{x_1+x_2}{2}\right) \leq \frac{f(x_1)+f(x_2)}{2}$ para todo x_1 e x_2 pertencentes ao domínio. Se o sinal da desigualdade for invertido, a função é dita côncava.

Consideremos agora o caso de uma aproximação com dois sítios. Numa rede hipercúbica temos $Nz/2$ pares de vizinhos mais próximos⁴ (número de ligações). Assim, no modelo de Ising:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^{Nz/2} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i \quad (2.26)$$

e

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\text{pares}} \mathcal{H}_2, \quad \text{onde } \mathcal{H}_2 = -JS_1 S_2 - \gamma(S_1 + S_2), \quad (2.27)$$

em que γ é o parâmetro variacional, cuja expressão será obtida a seguir.

Temos $N/2$ pares de spins no Hamiltoniano tentativa e então:

$$Z_0 = Z_2^{N/2}, \quad \text{onde } Z_2 = 2e^K \cosh(2\beta\gamma) + 2e^{-K}, \quad \text{com } K = \beta J. \quad (2.28)$$

Logo, a energia livre é:

$$F_0 = -\frac{N}{2\beta} \ln [2e^K \cosh(2\beta\gamma) + 2e^{-K}] \quad (2.29)$$

E assim, a magnetização por sítio com relação a \mathcal{H}_0 será:

$$m = -\frac{1}{N} \frac{\partial F_0}{\partial \gamma} = \frac{\sinh(2\beta\gamma)}{\cosh(2\beta\gamma) + e^{-2K}} \quad (2.30)$$

Para o cálculo do segundo termo, $\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0$, temos:

$$\langle \mathcal{H} \rangle_0 = -J \frac{Nz}{2} m^2 - H N m \quad \text{e} \quad \langle \mathcal{H}_0 \rangle_0 = -J \frac{N}{2} m^2 - \gamma N m \quad (2.31)$$

$$\Rightarrow \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = \langle \mathcal{H} \rangle_0 - \langle \mathcal{H}_0 \rangle_0 = -J \frac{Nz}{2} m^2 + J \frac{N}{2} m^2 - H N m + \gamma N m$$

$$\therefore \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = -\frac{NJ}{2} (z-1) m^2 - N(H - \gamma) m \quad (2.32)$$

Assim:

$$\Phi = F_0 - \frac{NJ}{2} (z-1) m^2 - N(H - \gamma) m \quad (2.33)$$

Minimizando Φ com relação a γ :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} = -\cancel{Nm} - NJ(z-1)m \frac{\partial m}{\partial \gamma} - NH \frac{\partial m}{\partial \gamma} + \cancel{Nm} + N\gamma \frac{\partial m}{\partial \gamma} = 0 \quad (2.34)$$

$$\Rightarrow [-NJ(z-1)m - N(H - \gamma)] \frac{\partial m}{\partial \gamma} = 0 \quad (2.35)$$

Logo, é imediato de (2.35) que:

$$\gamma = J(z-1)m + H \quad (2.36)$$

⁴ Cada um dos N sítios possui z ligações, sendo que cada uma destas é compartilhada entre dois vizinhos.

Com o parâmetro variacional obtido, substituindo em (2.30), a magnetização torna-se:

$$m = \frac{\sinh(2K(z-1)m + h)}{\cosh(2K(z-1)m + h) + e^{-2K}}, \quad \text{com } h = \beta H. \quad (2.37)$$

O método de Oguchi (aproximação de pares) é uma maneira mais direta de melhorar os resultados de campo médio [9]. A relação (2.37) fornece uma estimativa ligeiramente melhor da temperatura crítica em relação a Eq. (2.16) da aproximação de Weiss. Plotando-se ambas as curvas de $m \times T$ para $z = 4$, por exemplo, pode-se perceber graficamente a diferença (Fig. 11). O modelo de Ising na ausência de campo foi resolvido de forma exata para a rede quadrada por Onsager [35] em 1944, sendo a temperatura crítica aproximadamente 2,269.

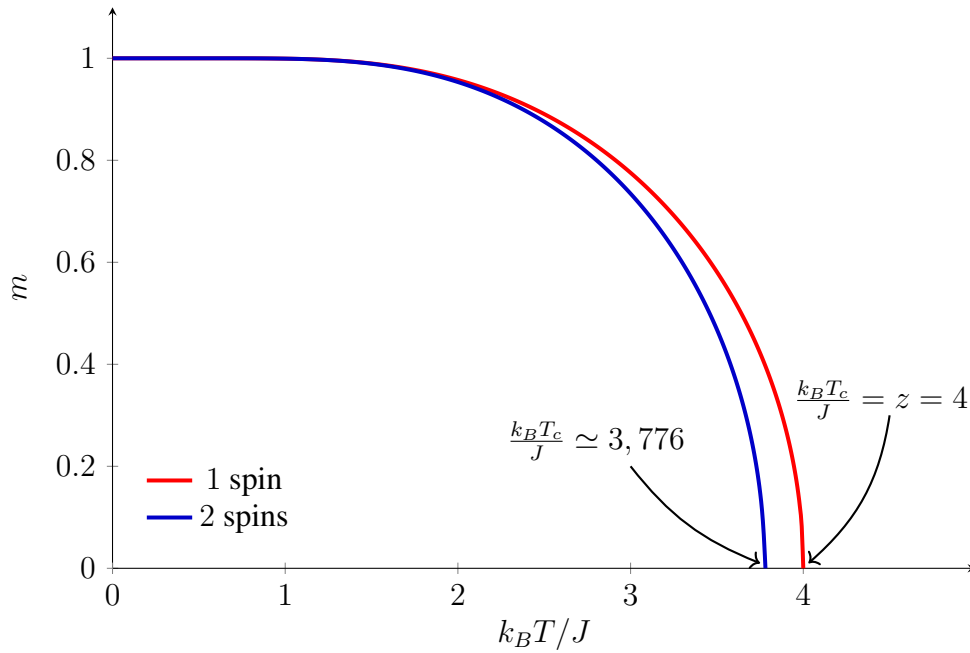


Figura 11 – Magnetização em função da temperatura reduzida: comparação entre os resultados nas aproximações de um e dois sítios.

2.4 Interação Dzyaloshinskii-Moriya e campo aleatório

Seja o Hamiltoniano $\mathcal{H} = -J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ descrevendo a interação de troca entre dois spins no modelo de Heisenberg. \mathcal{H} contém um produto escalar dos dois spins \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_2 , de modo que a energia é minimizada se eles estiverem numa orientação colinear (paralela ou antiparalela). Qualquer desvio desta configuração está associado a um custo energético. Supondo, por exemplo, que \mathbf{S}_1 esteja fixo e \mathbf{S}_2 forme um ângulo com \mathbf{S}_1 , o custo energético é o mesmo independentemente do desvio ser para um lado ou para outro. Portanto, a interação é simétrica. Quando atua entre dois spins \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_2 , a interação Dzyaloshinskii-Moriya, por sua vez, é descrita no Hamiltoniano pelo termo

$$\mathcal{H}_{DM} = -\mathbf{D} \cdot (\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2)$$

Nota-se que \mathcal{H}_{DM} contém um produto vetorial que resulta consequentemente num vetor perpendicular a \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_2 vezes (escalar) o vetor DM dado por \mathbf{D} . Isto assegura que pode ocorrer um ganho energético na configuração de ângulo não nulo entre os dois spins. Contudo, o desvio precisa ser na direção “certa”, uma vez que a direção oposta à configuração de colinearidade seria energeticamente desfavorável. Assim, a rotação do spin é favorecida em um sentido particular, de modo que se descreve a interação DM como sendo de natureza antissimétrica, servindo em aplicações a fenômenos com a presença de quiralidade [15], a exemplo das estruturas denominadas Skyrmions [36, 37]. A ação da interação DM (tendência em rotacionar os spins em pequenos ângulos) mais comumente ocorre em antiferromagnetos, resultando no efeito conhecido como ferromagnetismo fraco [6], como é o caso do composto La_2CuO_4 [38, 39].

Em anos recentes, a interação DM (levando-se em conta o efeito spin-órbita) tem sido vastamente investigada em diversos modelos aplicados ao estudo de sistemas com emaranhamento quântico [40–44]. Os trabalhos a respeito do emaranhamento usualmente tratam do conceito de “discórdia quântica” [45], do inglês *quantum discord*, que foi elaborado basicamente para quantificar o quanto as correlações entre partículas e conjuntos de partículas estão em desacordo com as leis clássicas da Física. Trata-se de uma quantidade introduzida por Henderson e Vedral [46] e (independentemente) Ollivier e Zurek [47], para a quantificação de correlações não clássicas.

Num certo sentido a interação DM é uma espécie de correção (ou aperfeiçoamento) do modelo de Heisenberg usual e outras abordagens para tratar sistemas magnéticos também tem sido adotadas. E, com intuito particular para obtenção de pontos tricríticos (como também é um dos aspectos largamente credenciados nos modelos com interação DM). Nesse contexto, ao longo dos recentes anos tem aumentado o interesse também nos modelos de spins em presença de campo magnético aleatório. O modelo de Ising em campo magnético aleatório foi introduzido inicialmente por Larkin [48] para supercondutores e posteriormente generalizado por Imry e Ma [49]. Este modelo foi largamente estudado ao longo das últimas décadas desde a sua proposição e é útil na descrição de uma série de sistemas, tais como transição de fase estrutural em ligas aleatórias e misturas de fluidos binários em meios porosos aleatórios [50]. Além disso, antiferromagnetos diluídos, tais como $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$, $\text{Rb}_2\text{Co}_x\text{Mg}_{1-x}\text{F}_4$ e $\text{Co}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ em campo magnético homogêneo comportam-se como ferromagnetos na presença de campo aleatório [51, 52]. De modo geral, uma distribuição de campo magnético aleatório produz efeitos drásticos nos diagramas de fase e propriedades magnéticas do sistema considerado. Sistemas de Ising sob influência de distribuições simétricas discretas, como bimodal [53] e trimodal [19] apresentam comportamento tricrítico, enquanto para distribuições simétricas contínuas (gaussianas) ocorrem apenas transições de segunda ordem [54].

No presente trabalho faremos a aplicação da distribuição de probabilidade “quenched” descrita por:

$$P(H_i) = p\delta(H_i) + \frac{1-p}{2} \left[\delta(H_i - H) + \delta(H_i + H) \right], \quad (2.38)$$

em que p é um número real ($0 \leq p \leq 1$) medindo a probabilidade de encontrar o campo

magnético aleatório $H_i = 0, (1 - p) / 2$ para campo magnético aleatório $H_i = \pm H$ e δ é a função delta de Dirac. Se $p = 0$, tem-se o caso de uma distribuição bimodal, com igual probabilidade para os campos longitudinais $\pm H$.

Os efeitos de campo aleatório no modelo de Heisenberg também vêm sendo tratados principalmente para o caso spin 1/2. [Albuquerque e Arruda \[55\]](#) estudaram as características de uma transição de fase com uma distribuição bimodal de campo no modelo de Heisenberg spin 1/2 através da teoria de campo efetivo para dois sítios, tendo sido encontrado ponto tricrítico. Posteriormente, [Albuquerque et al. \[56\]](#) trataram o mesmo sistema com efeito amorfo. [Sousa et al. \[57\]](#) estudaram os efeitos de uma distribuição bimodal de campo aleatório na transição de fase do modelo de Heisenberg clássico e quântico de spin 1/2 por meio da teoria de campo efetivo com dois sítios e também obtiveram comportamento tricrítico no sistema. [Akinci \[52\]](#) realizou um estudo dos efeitos de uma distribuição trimodal no modelo de Heisenberg quântico anisotrópico (spin 1/2) para redes cúbica simples e cúbica de corpo centrado, via formalismo EFT (teoria de campo efetivo). Recentemente, usando campo efetivo [Santos Filho et al. \[58\]](#) também investigaram o comportamento crítico do modelo de Heisenberg clássico de spin 1/2 diluído e na presença de campo aleatório com distribuição trimodal.

3

Resultados e Discussões

Neste capítulo são discutidos os diagramas de fases e as propriedades termodinâmicas do modelo de Heisenberg ferromagnético para os casos spin 1/2 e spin 1 com interação DM e campo magnético aleatório. O formalismo é desenvolvido por meio de uma aproximação de pares, mais conhecida como método de Oguchi [22, 34]. O capítulo está organizado em três seções, conforme a descrição a seguir. Na [Seção 3.1](#) são mostrados o formalismo e os resultados para o caso spin 1/2, enquanto a [Seção 3.2](#) é dedicada à apresentação do formalismo e resultados para o caso spin 1. Por fim, algumas considerações e discussões de trabalhos relacionados são abordadas na [Seção 3.3](#), que demonstra, por exemplo, a aplicação do modelo de Heisenberg spin 1 com anisotropia de campo cristalino para um *cluster* de três sítios nas redes kagomé e triangular.

3.1 Modelo de Heisenberg spin 1/2 com interação DM e campo magnético aleatório

O Hamiltoniano do modelo é descrito por:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} [(1 - \Delta)(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z] - \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) - \sum_i \mathbf{H}_i \cdot \mathbf{S}_i, \quad (3.1)$$

onde os termos dos somatórios representam a interação de troca anisotrópica, a interação DM e o campo magnético aleatório, respectivamente. No primeiro termo, considera-se $J_{ij} = J > 0$ (caso ferromagnético), $\Delta \in [0, 1]$ diz respeito ao parâmetro anisotrópico que define o modelo: $\Delta = 0$ e $\Delta = 1$ correspondem aos modelos de Heisenberg isotrópico e Ising, respectivamente. Em se tratando da presença de campo magnético externo, a terceira soma corresponde à interação Zeeman. Além disso, S_i^γ ($\gamma = x, y, z$) são as componentes do operador de spin 1/2 no sítio i de uma dada rede.

Consideraremos que $\mathbf{D} = D\mathbf{z}$ e $\mathbf{H} = H\mathbf{z}$, ou seja, \mathbf{D} e \mathbf{H} estando na direção \mathbf{z} . Aplicando-se então uma aproximação axial, de modo que se considera o sistema com ordenamento preferencial na direção \mathbf{z} , o Hamiltoniano efetivo ($-\beta\mathcal{H}$) para um *cluster* de dois sítios será dado por:

$$-\beta\mathcal{H}_{12} = K[(1 - \Delta)(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + L(S_1^x S_2^y - S_1^y S_2^x) + xS_1^z + yS_2^z, \quad (3.2)$$

sendo que $K = \beta J$, $L = \beta D$, $\beta = 1/k_B T$ (k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura), $x = K(z - 1)m + h_1$, $y = K(z - 1)m + h_2$ com $h_i = H_i/k_B T$ ($i = 1, 2$) e z é o número de coordenação.

Matricialmente, a Eq. (3.2) é representada por¹:

$$-\beta\mathcal{H}_{12} = \begin{bmatrix} K + x + y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -K + x - y & 2\alpha & 0 \\ 0 & 2\alpha^* & -K - (x - y) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & K - (x + y) \end{bmatrix}, \quad (3.3)$$

em que $\alpha = K(1 - \Delta) + iL$ e, consequentemente, $\alpha^* = K(1 - \Delta) - iL$.

Considerando $w = \alpha^* \alpha = \alpha \alpha^* = |\alpha|^2$, os quatro autovalores obtidos a partir de (3.3) são:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= K + x + y \\ \lambda_2 &= K - (x + y) \\ \lambda_3 &= -K + \sqrt{(x - y)^2 + 4w} \\ \lambda_4 &= -K - \sqrt{(x - y)^2 + 4w} \end{aligned}$$

A função de partição do modelo tem, portanto, a seguinte expressão:

$$Z = \sum_{n=1}^4 e^{\lambda_n} = 2e^K \left[\cosh(x + y) + e^{-2K} \cosh\left(\sqrt{(x - y)^2 + 4w}\right) \right],$$

com $w = K^2 [(1 - \Delta)^2 + (D/J)^2]$, em termos das variáveis primárias.

A magnetização (média térmica), por sua vez, é dada por:

$$\begin{aligned} m &= \left\langle \frac{S_1^z + S_2^z}{2} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} \frac{(S_1^z + S_2^z) e^{-\beta\mathcal{H}_{12}}}{Z} \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial x} + \frac{\partial \ln Z}{\partial y} \right) \\ \therefore m &= \frac{\sinh(x + y)}{\cosh(x + y) + e^{-2K} \cosh\left(\sqrt{(x - y)^2 + 4w}\right)} \end{aligned} \quad (3.4)$$

¹ Uma maneira simples e elegante de se obter tal representação consiste no uso do produto de Krocker com as matrizes de Pauli, conforme é mostrado no Apêndice A. Desta forma, evita-se o uso explícito de conjuntos de bases para a construção dos elementos da matriz que representa o Hamiltoniano [59]. Para maiores detalhes e uma abordagem mais completa, ver Refs. [60–62].

A energia livre reduzida (função da temperatura e da magnetização) para um *cluster* de dois sítios é dada por [14, 34, 63]:

$$f \equiv \frac{F}{NJ} = (z - 1)m^2 - K^{-1} \ln Z \quad (3.5)$$

O primeiro termo de (3.5) surge da aplicação do princípio variacional (desigualdade de Gibbs-Bogoliubov) conforme discutido na [Subseção 2.3.2](#). A energia livre é a ferramenta essencial para a análise das transições de fase de primeira ordem.

Para dar sentido físico completo à Eq. (3.4) aplica-se a média configuracional sobre as variáveis independentes h_i (lembrando que $x = K(z - 1)m + h_1$ e $y = K(z - 1)m + h_2$), considerando a distribuição de probabilidades. Será empregada a distribuição trimodal de campo aleatório dada na Eq. (2.38) com $h_i = H_i/k_B T$:

$$P(h_i) = p\delta(h_i) + \frac{1-p}{2}[\delta(h_i + h) + \delta(h_i - h)] \quad (3.6)$$

Desse modo, denotando $\langle \cdot \cdot \rangle_c$ por média configuracional:

$$\langle m \rangle_c = \int \prod_i dh_i P(h_i) m \quad (3.7)$$

Aplicando as Eqs. (3.4) e (3.6) em (3.7), a expressão obtida é dada no [Apêndice B](#). Por simplicidade e conveniência, a partir daqui a notação se manterá $m \equiv \langle m \rangle_c$, de modo que ao se usar m já estarão implícitas as médias térmica e configuracional da magnetização.

O mesmo procedimento é feito para a energia livre [54, 64]:

$$f \equiv \langle f \rangle_c = \int \prod_i dh_i P(h_i) \ln [\text{Tr} (e^{-\beta \mathcal{H}})] \quad (3.8)$$

Na vizinhança da linha de transição de segunda ordem naturalmente assume-se que m tem um valor muito pequeno, o que sugere uma expansão em série do lado direito da Eq. (3.4) em torno de $m = 0$ (teoria de Landau):

$$m \simeq am + bm^3 + cm^5 + \dots \quad (3.9)$$

Resolvendo (3.9) na vizinhança da transição de segunda ordem², temos:

$$m^2 = \frac{1-a}{b} \quad (3.10)$$

Os coeficientes da expansão³ dependem da temperatura e de todos os parâmetros envolvidos no modelo descrito pela Eq. (3.1). Dessa forma, a expansão em potências da magnetização m pode ser diretamente usada para localizar as linhas de transição de segunda ordem e os pontos

² Considerando, no segundo membro, até o termo de ordem cúbica da expansão.

³ As expressões dos coeficientes a e b são mostradas no [Apêndice C](#).

tricríticos. As temperaturas críticas correspondentes às transições de segunda ordem obedecem à condição $a = 1$, $b < 0$, enquanto os pontos tricríticos são localizados pela condição $a = 1$ e $b = 0$. Além disso, as temperaturas críticas das transições descontínuas (de primeira ordem) são obtidas a partir da comparação da energia livre nas fases ordenada e desordenada, ou seja, $F(m)$ e $F(0)$. A seguir são mostrados os diagramas de fases do modelo. Em todos os diagramas de fases bidimensionais apresentados convencionou-se que as curvas cheias (contínuas) representam transições de segunda ordem, enquanto as tracejadas correspondem às transições de primeira ordem. Entre as duas transições o ponto tricrítico é demarcado por um ponto no diagrama. Consideraremos $z = 6$ (para o caso de uma rede cúbica simples).

3.1.1 Diagramas de fases

A Fig. 12 mostra o diagrama de fases em três dimensões que descreve o comportamento crítico do sistema para $p = 0$ (distribuição bimodal do campo aleatório).

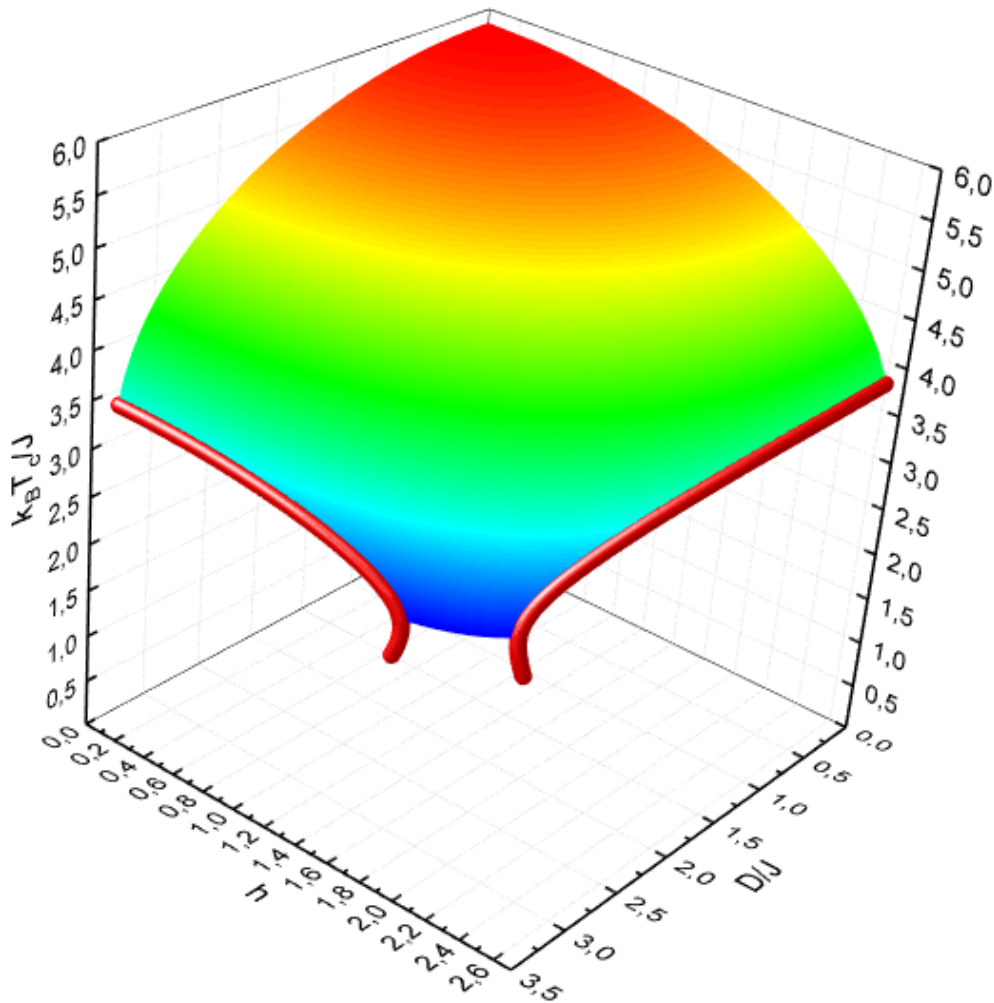


Figura 12 – Diagrama de fases $k_B T_c / J \times D / J \times h$ para $p = 0$, mostrando a superfície de transição de segunda ordem, delimitada pelas linhas de pontos tricríticos.

Para cada par de coordenadas $(h, D/J)$ há uma correspondente temperatura crítica (de segunda ordem) $k_B T_c/J$, de modo que toda a região crítica de segunda ordem é mostrada pela superfície colorida no diagrama, sendo esta delimitada pelas linhas vermelhas que indicam as soluções para pontos tricríticos. Tomando-se valores nulos de h e D/J , temos uma única solução para a temperatura crítica: $k_B T_c/J(h = 0, D/J = 0) \simeq 5,9$. À medida que se vai aumentando estes parâmetros, por outro lado, ocorre uma diminuição das temperaturas críticas, até que eventualmente se chega num ponto tricrítico, a partir do qual teremos transições de primeira ordem, cujas linhas serão mostradas nos diagramas bidimensionais seguintes (ver, por exemplo, Fig. 15).

É interessante ressaltar que as soluções para pontos tricríticos, conforme a condição $a = 1$ e $b = 0$ continuam indefinidamente a partir de uma temperatura crítica mínima de aproximadamente 0,8. Desse modo, só foram incluídos dados para o gráfico do diagrama em 3D mostrado na Fig. 12 até a temperatura crítica $k_B T_c/J = 2$. Tomando-se valores de temperaturas abaixo disto, chega-se gradativamente a um limite em que a superfície de transição de segunda ordem continua constante à medida que se aumenta h e D/J , de modo que no diagrama $D/J \times h$, D/J cresce de forma diretamente proporcional ao aumento do campo h e vice-versa. Nesta situação, as linhas de pontos tricríticos seguem também paralelamente, delimitando as soluções de segunda ordem. Os resultados estão, pois, suprimidos nesta região. Já para o modelo spin 1, que será discutido na Seção 3.2, tal comportamento não ocorre.

Na Fig. 13 é apresentado o comportamento do diagrama $k_B T_c/J \times h \times p$, para diferentes valores de p considerando $D/J = 0$. Para cada p dado é obtida uma curva de temperatura crítica vs. campo aleatório. Se $p = 1$, por exemplo, obtém-se uma reta, sendo a temperatura crítica invariável em relação ao campo, uma vez que para este valor de probabilidade, de acordo com a distribuição trimodal, apenas o valor nulo do campo é levado em conta na média configuracional. Para valores de p menores, começa a ocorrer a contribuição de probabilidades de se ter campo $\pm h$, sendo que para $p = 0,9$, por exemplo, já se observa uma ligeira variação/diminuição da temperatura crítica com o aumento do campo. Este é um comportamento esperado, já que o aumento do campo aleatório tem como efeito justamente promover um desordenamento e este, por sua vez, está diretamente associado à transição de fase que acontece, indentificada pela temperatura crítica. Quanto maior a presença de desordem no sistema, menores são as temperaturas críticas.

Por outro lado, a curva de pontos tricríticos (em vermelho) demarca o início das linhas de primeira ordem (tracejadas) para $p = 0$, $p = 0,1$ e $p = 0,2$. O ponto no diagrama em que termina a linha de pontos tricríticos, demarcado pela esfera em vermelho, representa o valor de p para o qual cessa a ocorrência de comportamento tricrítico (que será denotado por p^*). Ou seja, para o intervalo de valores $0 \leq p \leq 0,266$ o sistema exibe pontos tricríticos e transições de fase de primeira ordem. Os valores dos pontos tricríticos para cada p apresentado no diagrama são dados na Tab. 2.

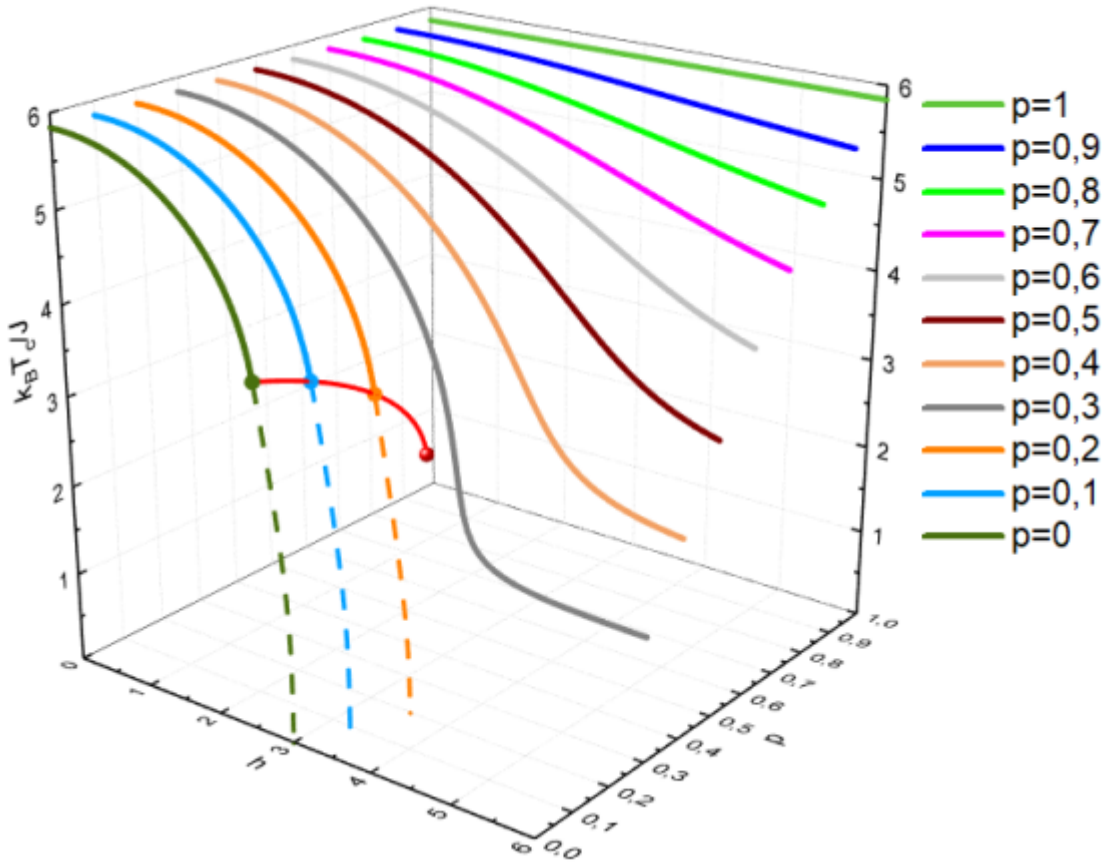


Figura 13 – Diagrama de fases $k_B T_c / J \times h \times p$. As linhas contínuas com p constante correspondem às transições de segunda ordem. As transições de primeira ordem, por sua vez, são dadas pelas curvas tracejadas. Para valores de $p > p^*$, todas as transições são de segunda ordem.

Tabela 2 – Coordenadas de pontos tricríticos para valores selecionados de p para o caso spin 1/2.

p	h_t	T_t
0	2,598	3,771
0,1	2,814	3,646
0,2	3,116	3,401
$p^* \simeq 0,266$	3,448	2,714

Para maiores detalhes em relação ao diagrama tridimensional apresentado na Fig. 12, serão mostradas a seguir algumas curvas de níveis (com valores constantes de temperatura) em duas dimensões. Desse modo, o que se observa nos diagramas $D/J \times h$ (Figs. 14 e 15) são curvas isotermas críticas de primeira e segunda ordem e os pontos tricríticos, sendo que na Fig. 14 são dadas as curvas de segunda ordem até a temperatura crítica $k_B T_c / J = 4$, enquanto a Fig. 15 mostra transições de segunda e de primeira ordem para temperaturas $k_B T_c / J = 3, 5$, $k_B T_c / J = 3$ e $k_B T_c / J = 2, 5$. Como pode ser visto do comportamento das curvas, para que se mantenha uma mesma temperatura crítica, à medida que se aumenta o valor do campo aleatório,

o valor do parâmetro DM diminui e vice-versa. Isso significa que ambas as variáveis contribuem para a desordem, levando o sistema a uma transição de fase. De um ponto de vista qualitativo, para cada curva de temperatura crítica há uma relação proporcionalmente inversa entre o campo aleatório h e o parâmetro D/J .

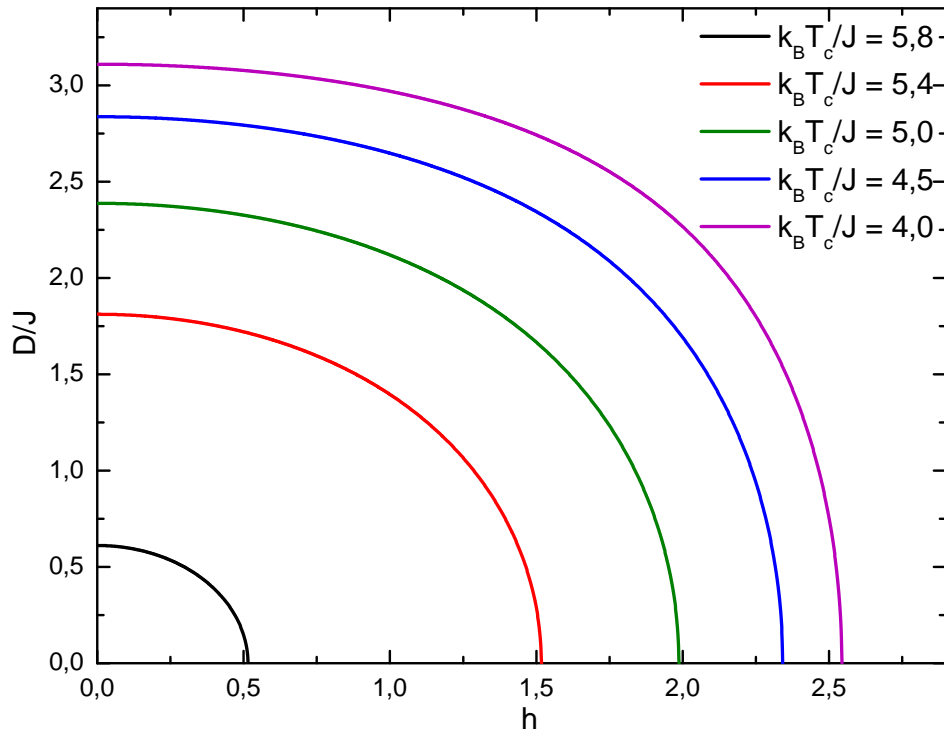


Figura 14 – Isothermas críticas no plano $D/J \times h$ para transições de segunda ordem.

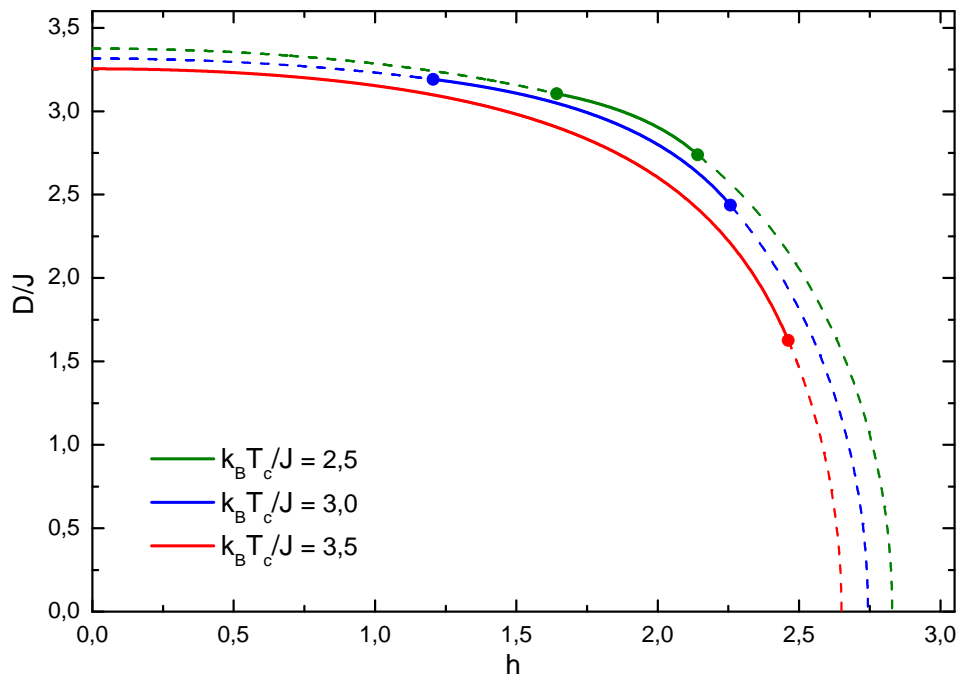


Figura 15 – Isothermas críticas no plano $D/J \times h$ correspondentes a transições de primeira e de segunda ordem, com a presença de pontos tricríticos separando-as.

O comportamento da temperatura crítica em relação ao parâmetro DM (com h fixo) e da temperatura crítica em relação ao campo magnético aleatório (para valores fixos de D/J) é mostrado, respectivamente, nas Figs. 16 e 17, incluindo as linhas de transição de primeira ordem. No primeiro caso, $k_B T_c/J \times D/J$, à medida que se aumenta o valor do campo aleatório, as temperaturas críticas diminuem, enquanto no diagrama $k_B T_c/J \times h$, as temperaturas decrescem com o aumento de D/J .

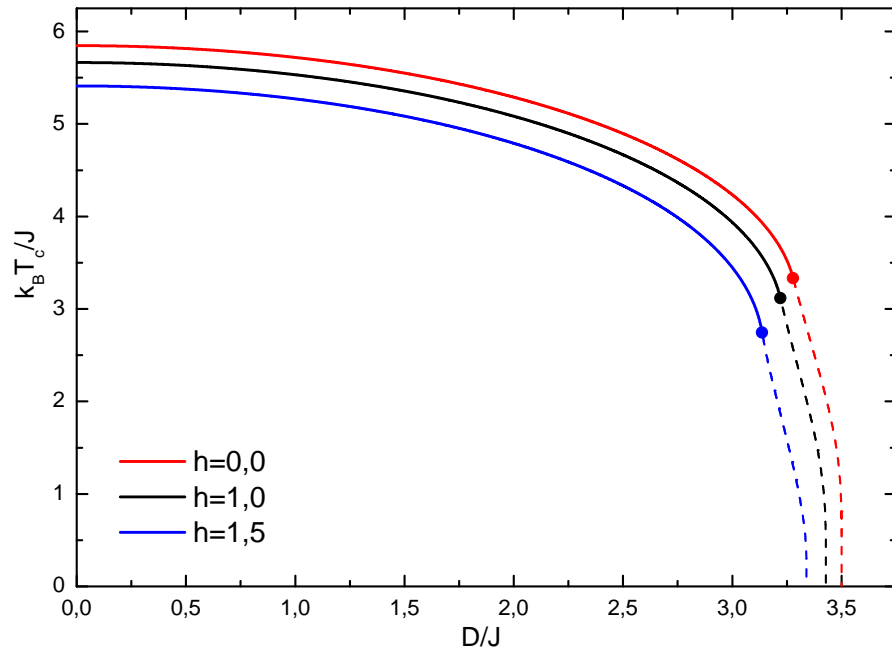


Figura 16 – Diagrama $k_B T_c / J \times D/J$ para valores constantes de h .

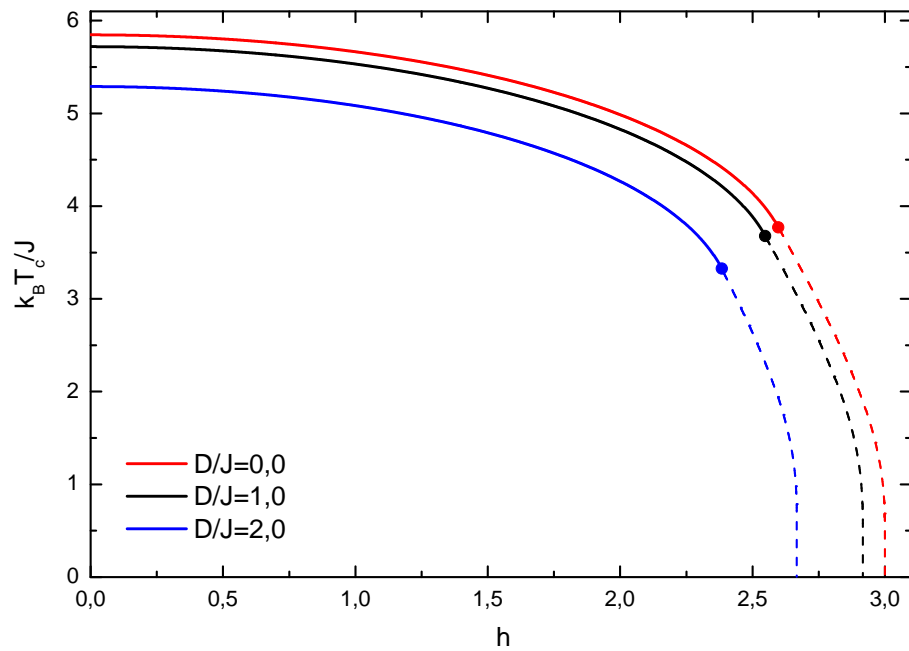


Figura 17 – Diagrama $k_B T_c / J \times h$ para valores constantes de D/J .

3.1.2 Caso $p = 1$

A seguir são apresentados os resultados para o caso $p = 1$. Para este valor, de acordo com a distribuição (3.6) o campo aleatório é completamente eliminado das equações obtidas, retomando-se o caso das Refs. [22, 63, 65]. Nesta situação, tem-se o modelo de Heisenberg com interação DM na ausência de campo.

O diagrama de fases, neste caso, para diferentes valores de Δ , é mostrado na Fig. 18. Quando $D/J \rightarrow 0$ temos as temperaturas críticas do modelo puro: $k_B T_c/J(\Delta = 1) = 5,847$, $k_B T_c/J(\Delta = 0,2) = 5,766$ e $k_B T_c/J(\Delta = 0) = 5,719$. À medida que D/J vai aumentando a partir de zero, as temperaturas da transição de segunda ordem vão decrescendo até atingirem o ponto tricrítico (T_t, D_t) , ponto final da linha de pontos críticos de segunda ordem. Para o ponto tricrítico (PTC) encontra-se que a temperatura crítica independe do parâmetro Δ , valendo $T_t = 10/3$, enquanto o parâmetro DM é dado por $D_t = \sqrt{10,75 - (1 - \Delta)^2}$. Analiticamente, as coordenadas do PTC são dadas pelas expressões:

$$T_t = \frac{2}{3}(z - 1) \text{ e } D_t = \sqrt{\frac{1}{4}T_t^2 \operatorname{arccosh}^2(2e^{2/T_t}) - (1 - \Delta)^2} \quad (3.11)$$

Nota-se, assim, de (3.11), que o valor de temperatura é dependente apenas do número de coordenação.

A partir do PTC, a transição de primeira ordem se dá com o aumento de D/J e decréscimo da temperatura crítica. No limite $k_B T_c/J \rightarrow 0$, o valor crítico de D/J é dado numericamente por $D_c = \sqrt{12,25 - (1 - \Delta)^2}$.

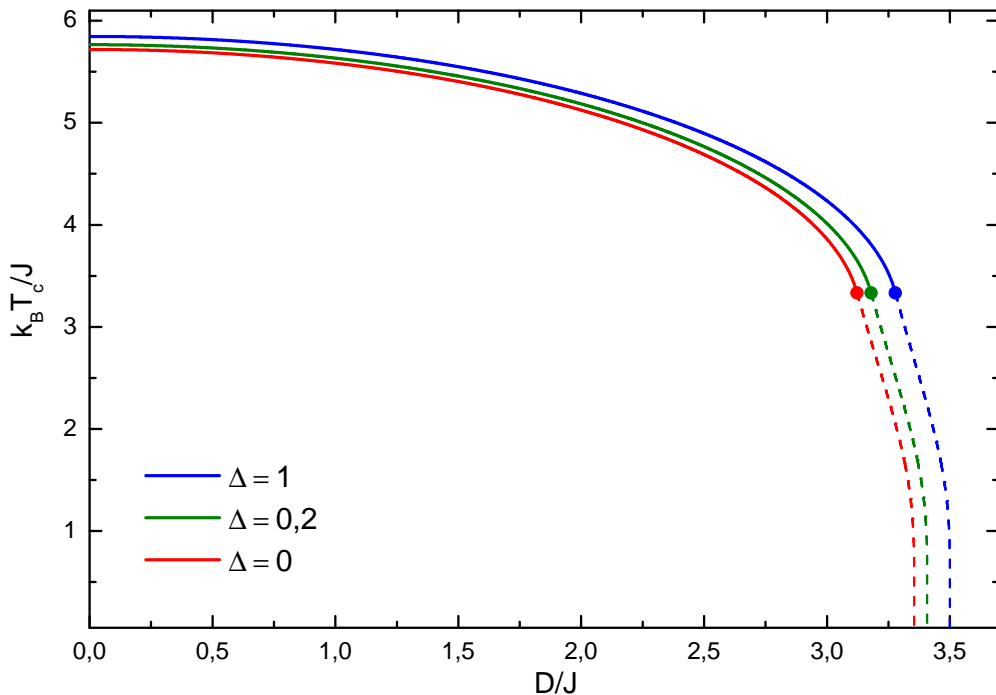


Figura 18 – Diagrama $k_B T_c/J \times D/J$ para valores constantes de Δ .

Explorado o diagrama de fases, as propriedades termodinâmicas abordadas a seguir são para $\Delta = 1$ (Ising).

Magnetização

A expressão da magnetização a campo nulo é dada por:

$$m = \frac{\sinh(2\gamma_0)}{\cosh(2\gamma_0) + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{w})}, \quad (3.12)$$

onde $\gamma_0 = K(z - 1)m$ e $w = K^2[(1 - \Delta)^2 + (D/J)^2]$, que é obtida considerando-se $p = 1$ na expressão (B.1).

O gráfico para alguns valores constantes de D/J é apresentado na Fig. 19. Quando $D/J = 0,8$ e $D/J = 3$ a magnetização decresce continuamente até atingir as temperaturas críticas, ocorrendo assim transições de segunda ordem. Já para $D/J = 3,38$ e $D/J = 3,42$ ocorrem transições de primeira ordem, de modo que a magnetização decresce com o aumento de $k_B T/J$ até um valor não nulo no qual salta descontinuamente para zero, o que é indicado pelas linhas pontilhadas verticais. As linhas tracejadas com as cores correspondentes à legenda são soluções instáveis, como no caso das reentrâncias que aparecem quando $D/J = 3,38$ e $D/J = 3,42$.

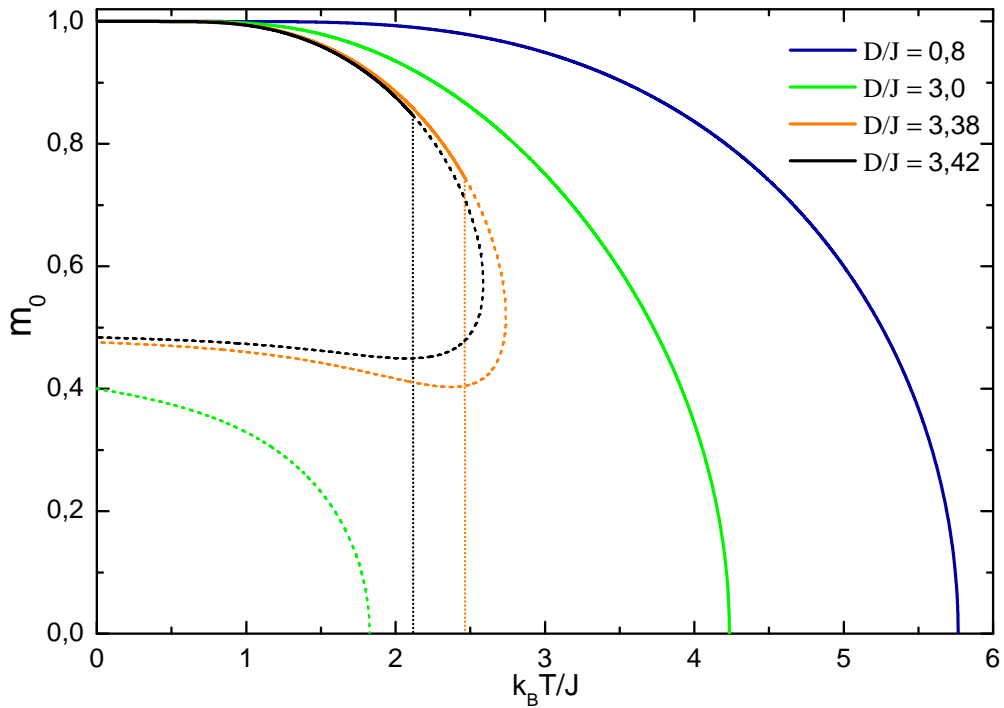


Figura 19 – Gráfico da variação da magnetização com a temperatura para valores seleccionados D/J e $\Delta = 1$.

Energia interna

A campo nulo, a energia interna é definida por [22]:

$$u = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{JN} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial K} \quad (3.13)$$

$$u = \frac{e^{-K} \left[\cosh(2\sqrt{w}) - 2 \left(\frac{\sqrt{w}}{K} \right) \sinh(2\sqrt{w}) \right] - e^K \left[\cosh(2\gamma_0) + 2 \left(\frac{\gamma_0}{K} \right) \sinh(2\gamma_0) \right]}{\cosh(2\gamma_0) + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{w})}, \quad (3.14)$$

onde $\gamma_0 = K(z-1)m$ e $w = K^2[(1-\Delta)^2 + (D/J)^2]$. O gráfico é apresentado na Fig. 20.

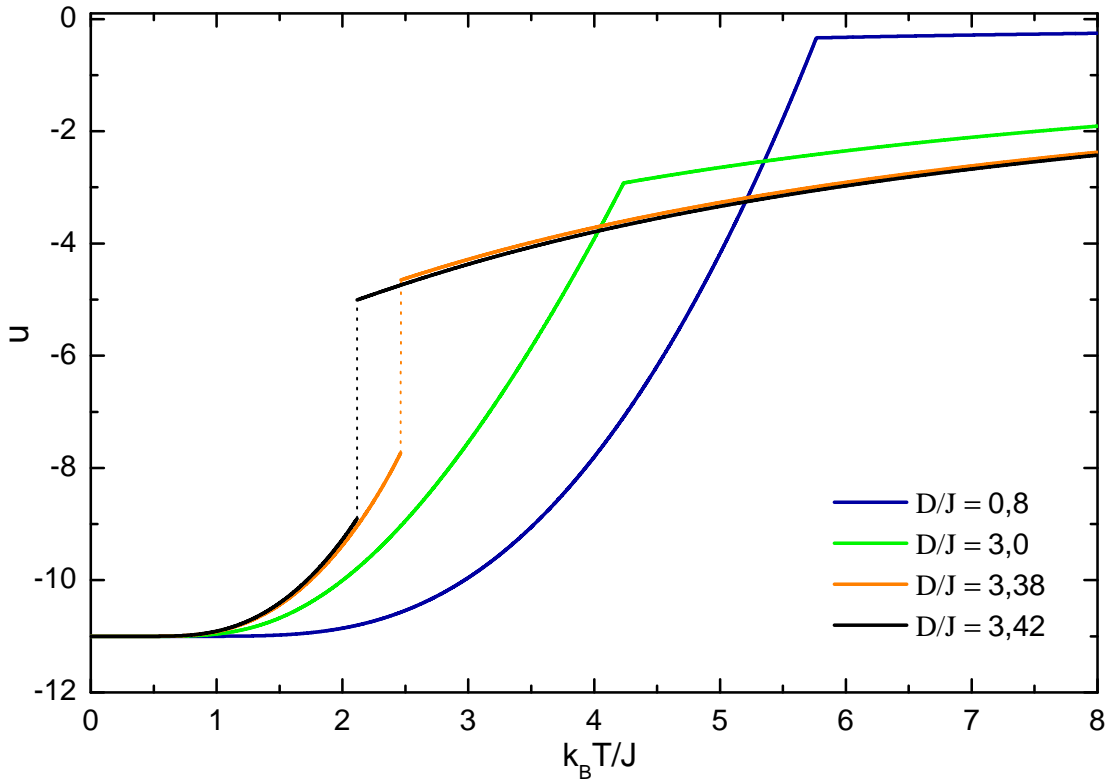


Figura 20 – Gráfico da variação da energia interna em função da temperatura com $\Delta = 1$, para alguns valores de D/J indicados na legenda.

As curvas de u em função de $k_B T_c/J$ para $\Delta = 1$ e valores seleccionados de D/J mostram um comportamento crescente à medida que se aumenta a temperatura. Quando a temperatura tende a zero, a energia reduzida fornece o valor $u = -11$. As descontinuidades vistas no gráfico indicam os pontos de transição de fase, nos quais temos as temperaturas críticas, sendo que para $D/J = 3,38$ e $D/J = 3,42$ as transições são de primeira ordem, o que se caracteriza pelo “salto” indicado pelas linhas tracejadas.

Calor específico

Por diferenciação numérica da energia interna obtém-se o gráfico do calor específico c em função da temperatura $k_B T_c/J$. Matematicamente: $c = \partial u / \partial T$. Assim como no caso anterior, da energia interna, as descontinuidades indicam os pontos de transição de fase.

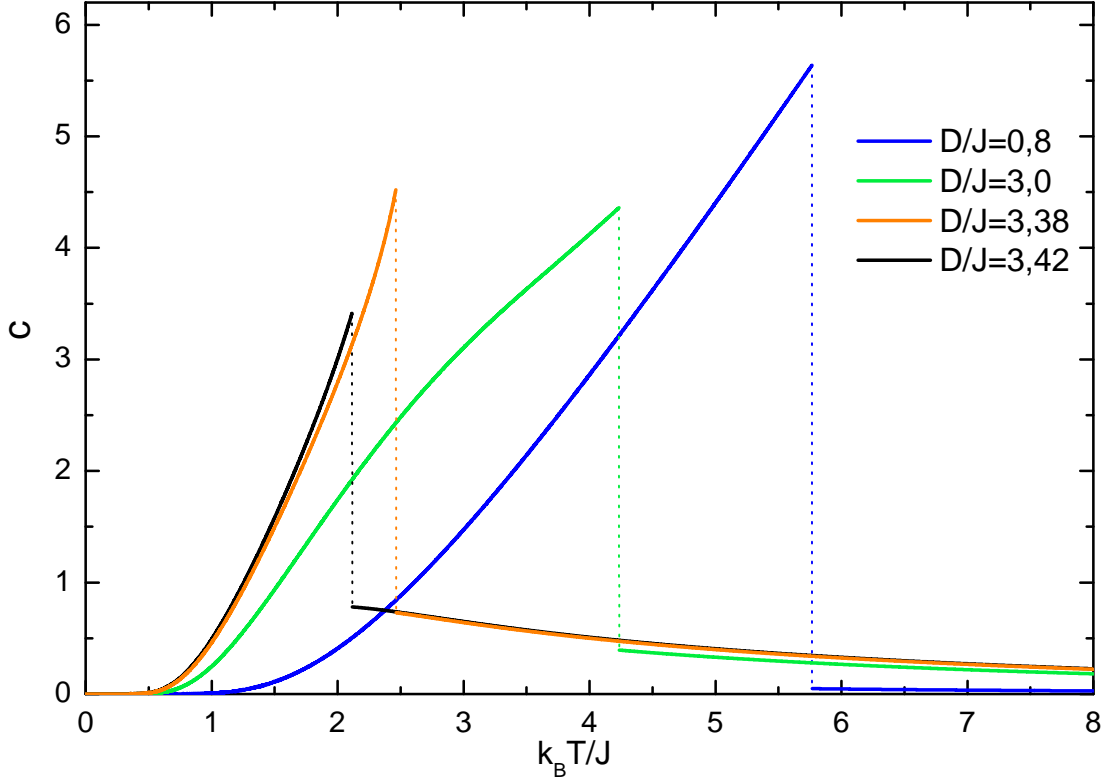


Figura 21 – Calor específico em função da temperatura com $\Delta = 1$ para valores constantes de D/J .

Susceptibilidade magnética

A susceptibilidade magnética a campo nulo é obtida a partir da relação

$$\chi = \left. \frac{\partial m}{\partial h} \right|_{h=0}, \quad (3.15)$$

usando m da Eq. (3.12) com $\gamma_0 = K(z-1)m + h$, considerando-se a presença do campo externo.

Assim, temos:

$$\chi = \frac{1 + e^{-2K} \cosh(2\gamma_0) \cosh(2\sqrt{w})}{2 \left(\frac{\gamma_0}{m} \right) [1 + e^{-2K} \cosh(2\gamma_0) \cosh(2\sqrt{w})] - [\cosh(2\gamma_0) + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{w})]^2}, \quad (3.16)$$

sendo agora, em (3.16), $\gamma_0 = K(z-1)m$ e $w = K^2[(1-\Delta)^2 + (D/J)^2]$.

O gráfico da Fig. 22 mostra o comportamento da susceptibilidade a campo nulo em função da temperatura reduzida para a rede cúbica simples com parâmetro anisotrópico $\Delta = 1$,

para valores constantes $D/J = 3,38, 3,42$. Pode se ver a ocorrência de descontinuidades na temperatura crítica de primeira ordem. Para $T > T_c$, na fase paramagnética ($m_0 = 0$), a susceptibilidade apresenta um máximo, comportamento anômalo atribuído à competição entre as interações J e DM [22].

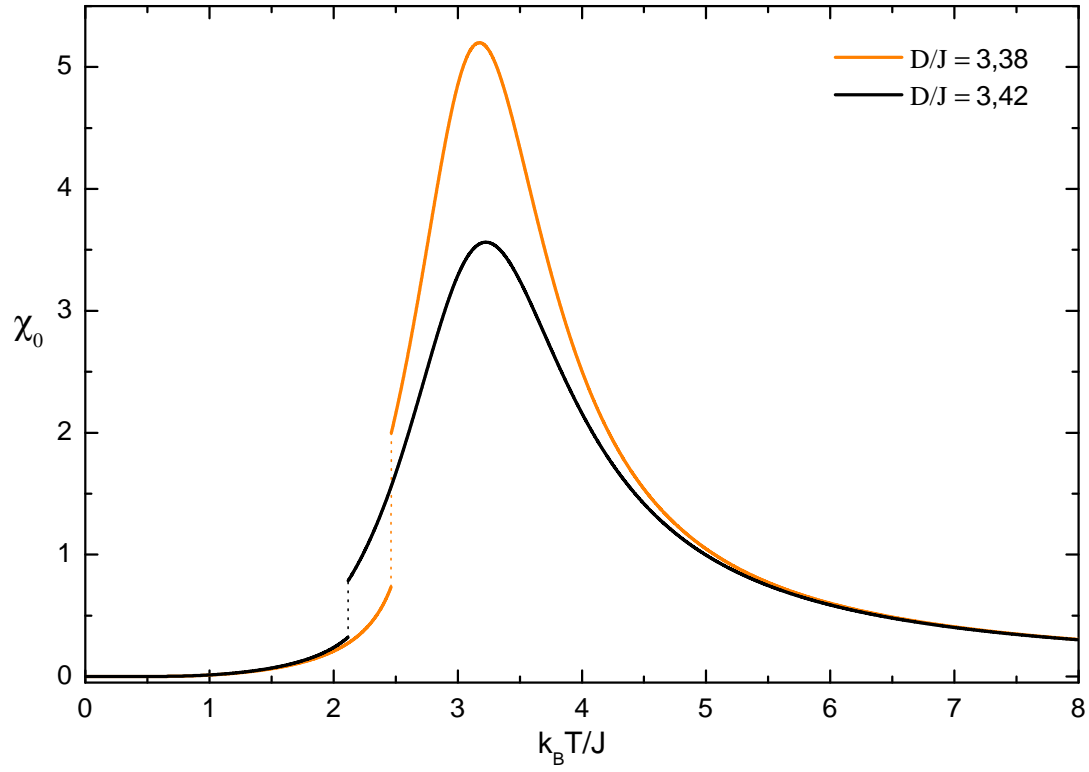


Figura 22 – Susceptibilidade magnética a campo nulo em função da temperatura com $\Delta = 1$ para valores seleccionados D/J .

3.2 Modelo de Heisenberg spin 1 com interação DM e campo magnético aleatório

Matematicamente, o Hamiltoniano é o mesmo da Eq. (3.1):

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} [(1 - \Delta)(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z] - \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) - \sum_i \mathbf{H}_i \cdot \mathbf{S}_i \quad (3.17)$$

Novamente os termos em (3.17) representam, sequencialmente, interações de troca anisotrópicas, a interação DM e um campo magnético aleatório, sendo que S_i^γ ($\gamma = x, y, z$) representa as componentes do operador de spin 1 no sítio i .

Aplicando a aproximação axial com $\mathbf{H} = H\mathbf{z}$, $\mathbf{D} = D\mathbf{z}$ e $J_{ij} = J > 0$ (modelo ferromagnético), o Hamiltoniano efetivo para um par spins mais uma vez será dado por:

$$-\beta\mathcal{H}_{12} = K[(1 - \Delta)(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] + L(S_1^x S_2^y - S_1^y S_2^x) + xS_1^z + yS_2^z, \quad (3.18)$$

onde $K = \beta J$, $L = \beta D$, $\beta = 1/k_B T$ (k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura), $x = K(z - 1)m + h_1$, $y = K(z - 1)m + h_2$ com $h_i = H_i/k_B T$ ($i = 1, 2$) e z é o número de coordenação.

De modo análogo ao que foi feito para o caso spin 1/2, mas agora fazendo uso das matrizes de Pauli para $S = 1$ (dadas no Apêndice A), a Eq. (3.18) será representada pela matriz 9×9 :

$$-\beta\mathcal{H}_{12} = \begin{bmatrix} \mathbf{h}_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x & 0 & \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{h}_{33} & 0 & \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha^* & 0 & y & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha^* & 0 & 0 & 0 & \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -y & 0 & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha^* & 0 & \mathbf{h}_{77} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha^* & 0 & -x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{h}_{99} \end{bmatrix}, \quad (3.19)$$

onde $\mathbf{h}_{11} = K + x + y$, $\mathbf{h}_{33} = -K + x - y$, $\mathbf{h}_{77} = -K - (x - y)$, $\mathbf{h}_{99} = K - (x + y)$, $\alpha = K(1 - \Delta) + iL$ e, conseqüentemente, $\alpha^* = K(1 - \Delta) - iL$.

Conforme esperado, assim como no caso spin 1/2, a matriz $-\beta\mathcal{H}_{12}$ dada pela Eq. (3.19) é Hermitiana, pois coincide com o complexo conjugado de sua transposta⁴. Desse modo, trata-se de uma matriz quadrada e seus elementos, simétricos em relação à diagonal (com elementos reais), são conjugados, ou seja:

$$\mathbf{h}_{ij} = \mathbf{h}_{ji}^* \text{ para } i \neq j.$$

⁴ Uma matriz \mathcal{M} é Hermitiana se obedece à condição $\mathcal{M} = (\mathcal{M}^T)^*$ ou $\mathcal{M}_{ji}^* = \mathcal{M}_{ij}$.

Com o cálculo dos autovalores da matriz (3.19) podemos montar a função de partição e com isso obter todas as demais propriedades do sistema. Considerando $w = \alpha^* \alpha = \alpha \alpha^* = |\alpha|^2$, os nove autovalores⁵ obtidos são:

$$\begin{aligned}
 \lambda_1 &= K + x + y \\
 \lambda_2 &= K - (x + y) \\
 \lambda_3 &= \frac{x + y + \sqrt{(x - y)^2 + 4w}}{2} \\
 \lambda_4 &= \frac{x + y - \sqrt{(x - y)^2 + 4w}}{2} \\
 \lambda_5 &= \frac{-(x + y) + \sqrt{(x - y)^2 + 4w}}{2} \\
 \lambda_6 &= \frac{-(x + y) - \sqrt{(x - y)^2 + 4w}}{2} \\
 \lambda_7 &= -\frac{2K}{3} + \frac{2\sqrt{K^2 + 6w + 3(x - y)^2}}{3} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(\frac{K(K^2 + 9w - 9(x - y)^2)}{\sqrt{(K^2 + 6w + 3(x - y)^2)^3}} \right) \right] \\
 \lambda_8 &= -\frac{2K}{3} - \frac{2\sqrt{K^2 + 6w + 3(x - y)^2}}{3} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(\frac{K(K^2 + 9w - 9(x - y)^2)}{\sqrt{(K^2 + 6w + 3(x - y)^2)^3}} \right) \right] \\
 \lambda_9 &= -\frac{2K}{3} - \frac{2\sqrt{K^2 + 6w + 3(x - y)^2}}{3} \cos \left[\frac{\pi}{3} + \frac{1}{3} \arccos \left(\frac{K(K^2 + 9w - 9(x - y)^2)}{\sqrt{(K^2 + 6w + 3(x - y)^2)^3}} \right) \right]
 \end{aligned}$$

Com os autovalores dados acima, a função de partição Z do modelo será dada pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
 Z &= \sum_{n=1}^9 e^{\lambda_n} = 2e^K \cosh(x + y) + 4 \cosh\left(\frac{x + y}{2}\right) \cosh\left(\frac{\sqrt{(x - y)^2 + 4w}}{2}\right) \\
 &+ 2e^{-2K/3} \cosh \left\{ \frac{2\sqrt{K^2 + 6w + 3(x - y)^2}}{3} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(\frac{K(K^2 + 9w - 9(x - y)^2)}{\sqrt{(K^2 + 6w + 3(x - y)^2)^3}} \right) \right] \right\} \\
 &+ \exp \left\{ -\frac{2K}{3} - \frac{2\sqrt{K^2 + 6w + 3(x - y)^2}}{3} \cos \left[\frac{\pi}{3} + \frac{1}{3} \arccos \left(\frac{K(K^2 + 9w - 9(x - y)^2)}{\sqrt{(K^2 + 6w + 3(x - y)^2)^3}} \right) \right] \right\}.
 \end{aligned}$$

⁵ A presença de mais de uma variável (K, x, y) em elementos da diagonal principal de (3.19) torna o cálculo dos autovalores uma tarefa não tão trivial para muitos softwares. Programas como o wxMaxima, por exemplo, definitivamente não exprimem todos os autovalores reais, apesar da propriedade evidente de hermiticidade da matriz. Assim, mais especificamente os três últimos autovalores foram obtidos a partir de uma análise do polinômio característico. A fatoração do polinômio característico dá dois monômios que fornecem λ_1 e λ_2 , dois polinômios de grau 2, cujas soluções são $\lambda_3, \lambda_4, \lambda_5$ e λ_6 e, por fim, um polinômio cúbico, cujas raízes equivalem a λ_7, λ_8 e λ_9 . As soluções de uma equação cúbica (com exigência de três raízes reais) podem ser obtidas a partir das fórmulas mostradas na Ref. [66].

E a magnetização, por sua vez, será:

$$m = \frac{1}{Z} \left[2e^K \cosh(x+y) + 2 \cosh\left(\frac{x+y}{2}\right) \cosh\left(\frac{\sqrt{(x-y)^2 + 4w}}{2}\right) \right]$$

Conforme já mostrado na seção anterior, após o cálculo das médias configuracionais da magnetização e da energia livre são obtidos os resultados mostrados a seguir, a começar pelos diagramas de fases. Estes provêm da expansão de Landau da Eq. (3.9).

3.2.1 Diagramas de fases

A Fig. 23 mostra o diagrama de fases tridimensional que mapeia o comportamento crítico do sistema considerado, com $\Delta = 1$ (Ising) e $p = 0$ (correspondente a uma distribuição bimodal).

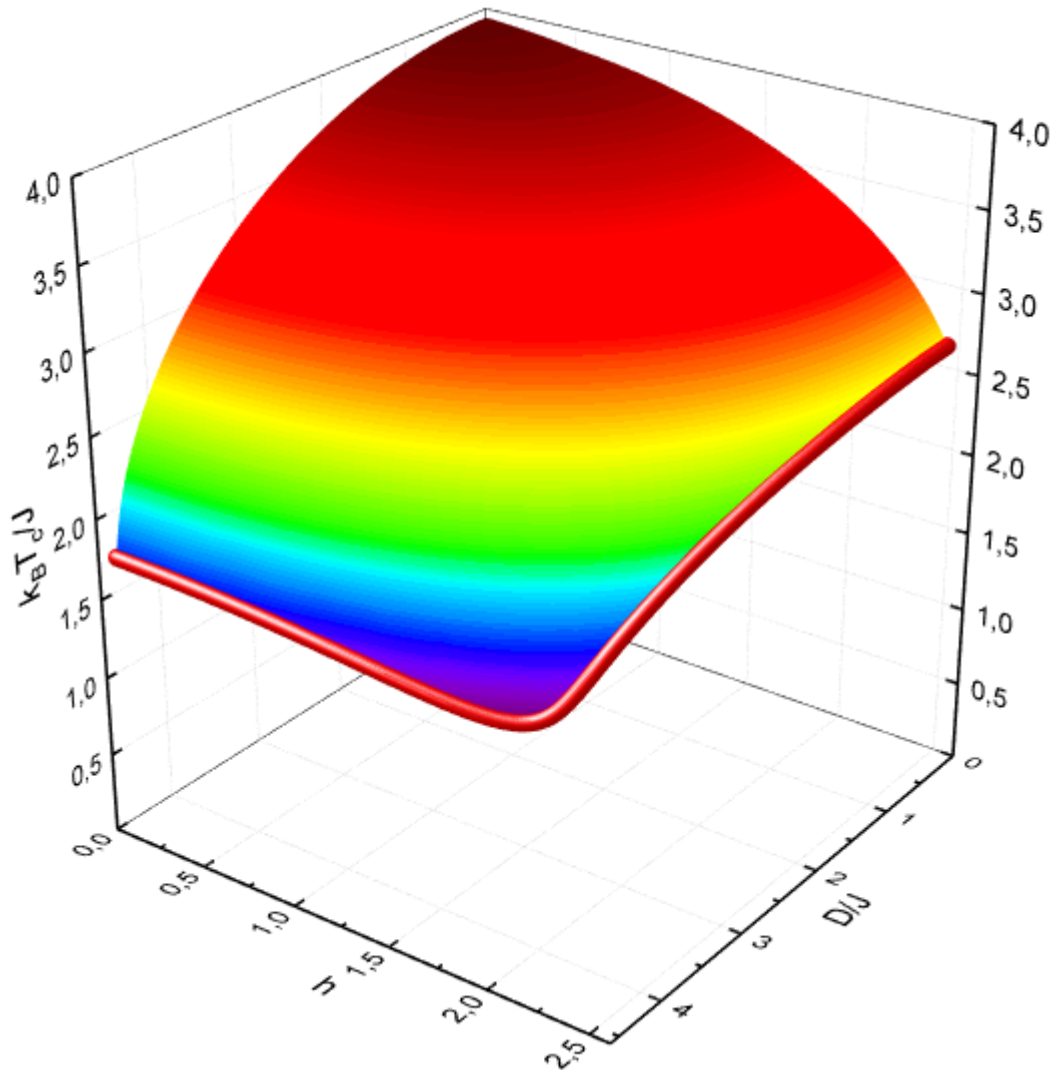


Figura 23 – Diagrama de fases $k_B T_c / J \times D / J \times h$ para $p = 0$, mostrando a superfície de transição de segunda ordem, delimitada pela linha de pontos tricríticos.

O comportamento é qualitativamente análogo ao diagrama da Fig. 12 apresentado na seção anterior. Mas cabe ressaltar algumas diferenças em relação ao caso $S = 1/2$. A primeira delas consiste na redução temperatura crítica quando temos o modelo puro: $k_B T_c/J (D/J = h = 0) \simeq 3,94$. À medida que se aumenta o valor de D/J e/ou h as temperaturas críticas começam a diminuir, evidenciando o comportamento competitivo com a interação J que tende a manter uma magnetização forte e, conseqüentemente, temperaturas críticas mais altas. Todos os pontos de temperatura crítica de segunda ordem para distintos valores de D/J e h são representados pela superfície colorida no diagrama.

Outra peculiaridade é que, diferentemente do caso spin 1/2, as soluções para pontos tricríticos (condição $a = 1, b = 0$) delimitam completamente a superfície crítica de segunda ordem (colorida), mesmo quando h e D/J assumem os maiores valores. Para valores de $k_B T_c/J$ abaixo da linha de PTCs (em vermelho) há também uma superfície de transição de primeira ordem, mas que não foi esboçada. Porém, algumas linhas desta superfície são mostradas em diagramas bidimensionais apresentados a seguir, como pode se ver na Fig. 25, por exemplo. Os pontos tricríticos no diagrama $k_B T_c/J \times D/J \times h$ aparecem no intervalo de temperaturas críticas $1,324 \leq k_B T_c/J \leq 2,631$, sendo a temperatura inferior numericamente correspondente ao par de coordenadas $h \simeq 1,86$ e $D/J \simeq 3,9$, enquanto a temperatura superior corresponde ao limite $D/J \rightarrow 0$.

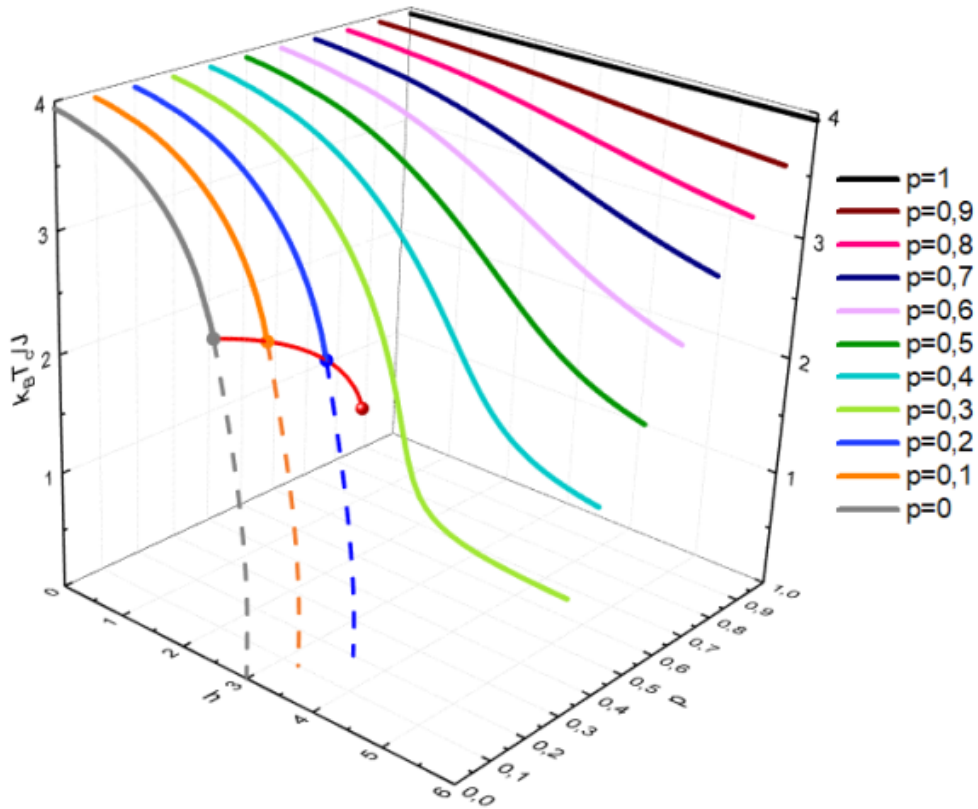


Figura 24 – Diagrama de fases $k_B T_c/J \times h \times p$. As linhas contínuas (para cada valor constante de p) correspondem às transições de segunda ordem. As transições de primeira ordem são dadas pelas curvas tracejadas.

No limite $D/J \rightarrow 0$, o diagrama $k_B T_c/J \times h \times p$ é qualitativamente semelhante ao caso do modelo com spin $1/2$, como pode ser visto na Fig. 24. A curva de pontos tricríticos (em vermelho) demarca o início das linhas de primeira ordem para $p = 0$, $p = 0,1$ e $p = 0,2$. O valor final p^* é indicado pelo ponto vermelho ao fim da linha tricrítica. Para valores de p maiores, todas as transições são de segunda ordem. A principal diferença em relação o caso spin $1/2$ consiste nos valores menores de temperaturas críticas, por exemplo, $k_B T_c/J(h = 0) \simeq 3,94$. Quanto ao ponto tricrítico final, correspondente ao valor p^* , tem coordenadas $(p, h, k_B T_c/J) \simeq (0,249, 3,276, 1,947)$. As coordenadas dos pontos tricríticos com $p = 0$, $p = 0,1$ e $p = 0,2$ são dadas na Tab. 3.

Tabela 3 – Coordenadas de pontos tricríticos para valores selecionados de p para o caso spin 1.

p	h_t	T_t
0	2,444	2,631
0,1	2,662	2,535
0,2	2,987	2,335
$p^* \simeq 0,249$	3,275	1,947

A seguir, as curvas isotermas críticas no plano $D/J \times h$ referentes ao diagrama da Fig. 23 são mostradas na Fig. 25, incluindo as soluções de primeira ordem.

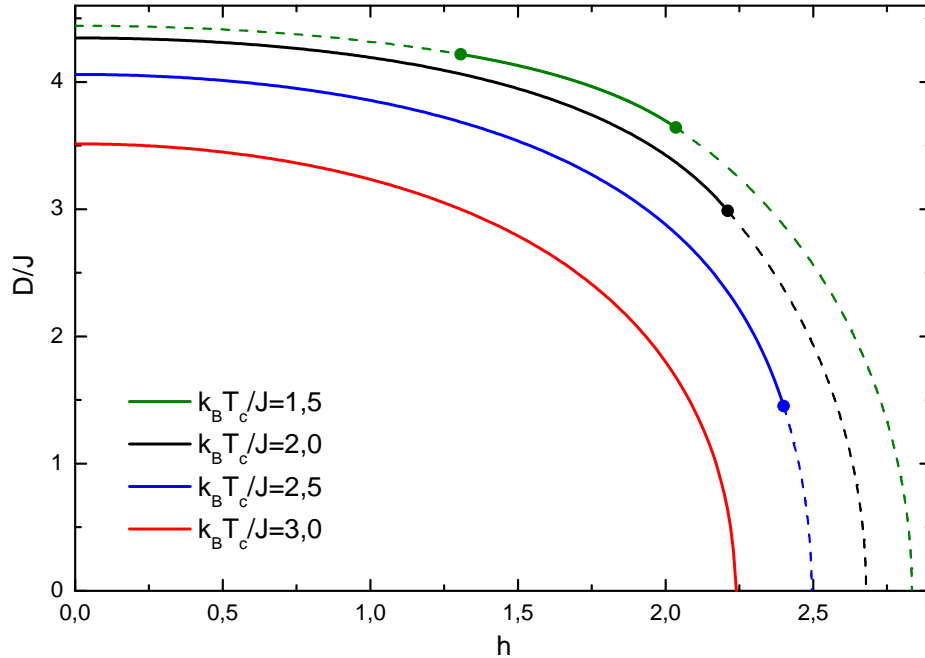


Figura 25 – Isotermas críticas no plano $D/J \times h$ mostrando as soluções de primeira e segunda ordem e os correspondentes pontos tricríticos para valores fixos de temperatura crítica.

Para $k_B T_c/J = 3$ há apenas transições de segunda ordem. Já quando $k_B T_c/J = 2,5$, por exemplo, temos um ponto tricrítico em $h_t = 2,4$ e $D_t = 1,45$, usando a notação $D \equiv D/J$.

Para $h > h_t$ e $D < D_t$, a solução de primeira ordem é dada pela curva tracejada. O mesmo se dá para curvas com temperaturas menores, como se pode ver no gráfico as curvas $k_B T_c/J = 2$ e $k_B T_c/J = 1,5$.

Mantendo D/J fixo com probabilidade $p = 0$, o diagrama da Fig. 26 mostra o comportamento da temperatura crítica com o campo aleatório. Para ver também como varia a temperatura crítica com o parâmetro DM em diferentes valores do campo h foi feito o gráfico da Fig. 27. Ambos os diagramas incluem as linhas de primeira ordem.

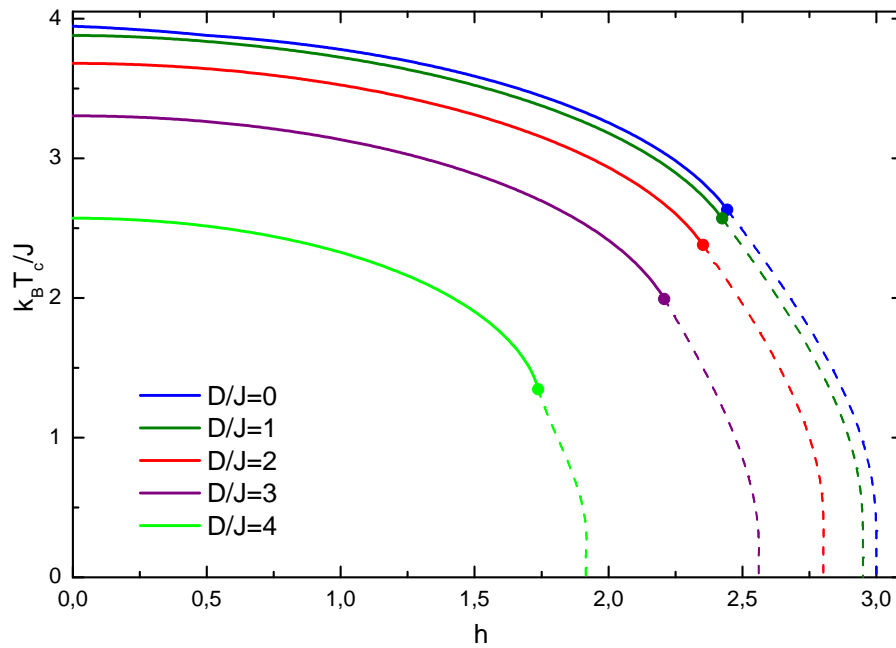


Figura 26 – Diagrama $k_B T_c/J \times h$ para spin 1.

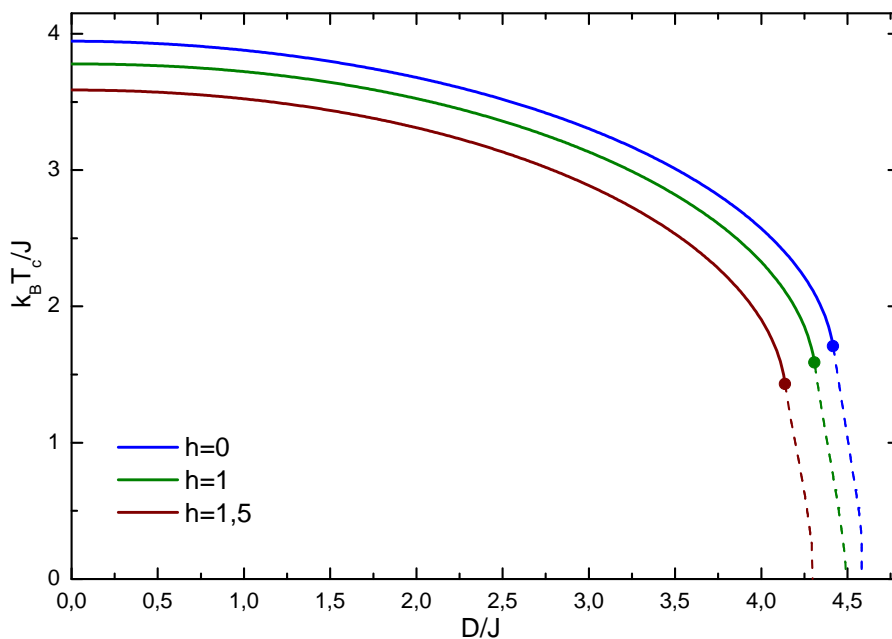


Figura 27 – Diagrama $k_B T_c/J \times D/J$ para spin 1.

3.2.2 Caso $p = 1$

Novamente considerando a situação onde $p = 1$, temos um caso particular equivalente ao formalismo na ausência de campo. Como está se tratando agora do modelo com spin 1, retoma-se então o caso já conhecido da Ref. [14]. Os procedimentos são análogos aos já apresentados na Subseção 3.1.2.

O diagrama de fases correspondente pode ser visto na Fig. 28. Assim como no caso spin 1/2, as temperaturas dos pontos tricríticos independem do parâmetro anisotrópico de troca do modelo e é equivalente a $T_t = 1,71$, com $D_t = \sqrt{19,50 - (1 - \Delta)^2}$. No limite $k_B T_c/J \rightarrow 0$, na transição de primeira ordem, $D_c = \sqrt{21 - (1 - \Delta)^2}$. Conforme constatado por Sun e Kong, em relação ao caso spin 1/2 as temperaturas críticas são menores, mas o parâmetro DM é maior⁶. Quando $D/J \rightarrow 0$, por exemplo, agora temos as temperaturas críticas: $k_B T_c/J(\Delta = 1) = 3,92$, $k_B T_c/J(\Delta = 0,3) = 3,89$ e $k_B T_c/J(\Delta = 0) = 3,86$.

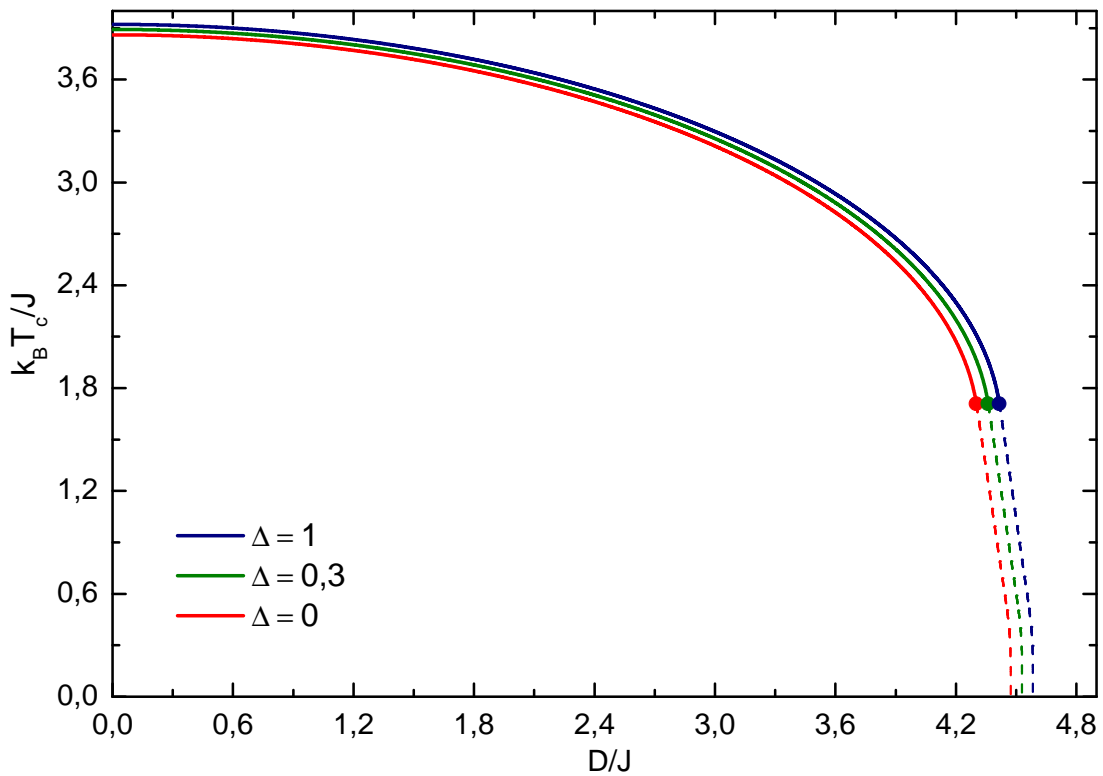


Figura 28 – Diagrama de fases $k_B T_c/J \times D/J$ para valores constantes de Δ .

Para as propriedades termodinâmicas mostradas a seguir (magnetização, energia interna, calor específico e susceptibilidade magnética) é considerado o caso $\Delta = 1$ (limite Ising).

⁶ Comparar com o diagrama da Fig. 18.

Magnetização

A expressão da magnetização, neste caso, é dada por:

$$m = \frac{e^K \sinh(2\gamma_0) + \sinh(\gamma_0) \cosh(\sqrt{w})}{e^K \cosh(2\gamma_0) + \frac{1}{2}e^{-K} + e^{-K/2} \cosh\left(\frac{1}{2}\sqrt{8w + K^2}\right) + 2 \cosh(\gamma_0) \cosh(\sqrt{w})}, \quad (3.20)$$

com $\gamma_0 = K(z-1)m$ e $w = K^2[(1-\Delta)^2 + (D/J)^2]$.

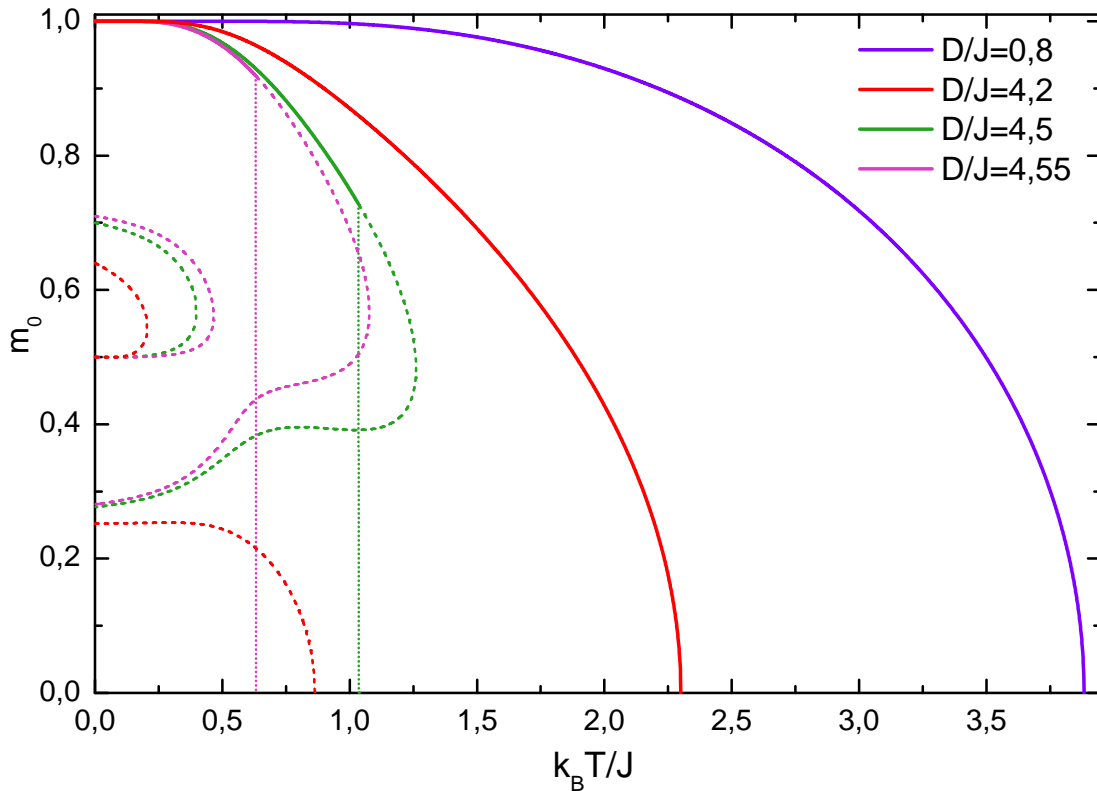


Figura 29 – Magnetização em função da temperatura para valores constantes de D/J e $\Delta = 1$.

O gráfico da magnetização para quatro valores selecionados de D/J é apresentado na [Fig. 29](#). Quando $D/J = 0,8$ e $D/J = 4,2$, a magnetização decresce continuamente da fase ferromagnética até zero, ao atingir as temperaturas críticas, ocorrendo assim transições de segunda ordem. Já para $D/J = 4,5$ e $D/J = 4,55$ ocorrem transições de primeira ordem, de modo que a magnetização decresce com o aumento de $k_B T/J$ até um valor não nulo no qual salta descontínuamente para zero, o que é indicado pelas linhas pontilhadas verticais. As linhas tracejadas com as cores correspondentes à legenda equivalem às soluções instáveis, como no caso das reentrâncias que aparecem quando $D/J = 4,5$ e $D/J = 4,55$.

Energia interna

A expressão da energia interna é dada por:

$$u = \frac{-X}{2e^K \cosh(2\gamma_0) + e^{-K} + 2e^{-\frac{K}{2}} \cosh\left(\frac{1}{2}\sqrt{8w + K^2}\right) + 4 \cosh(\gamma_0) \cosh(\sqrt{w})}, \quad (3.21)$$

sendo

$$\begin{aligned} X = & 2e^K \cosh(2\gamma_0) + 4(z-1)me^K \sinh(2\gamma_0) - e^{-K} \\ & - e^{-\frac{K}{2}} \cosh\left(\frac{1}{2}\sqrt{8w + K^2}\right) + e^{-\frac{K}{2}} \sqrt{\frac{8w + K^2}{K^2}} \sinh\left(\frac{1}{2}\sqrt{8w + K^2}\right) \\ & + 4(z-1)m \sinh(\gamma_0) \cosh(\sqrt{w}) + 4\sqrt{\frac{w}{K^2}} \cosh(\gamma_0) \sinh(\sqrt{w}), \end{aligned}$$

com $\gamma_0 = K(z-1)m$ e $w = K^2[(1-\Delta)^2 + (D/J)^2]$.

As curvas de u em função de $k_B T_c/J$ para $\Delta = 1$ e valores seleccionados de D/J mostram um comportamento qualitativamente semelhante ao caso $S = 1/2$, ou seja, crescente com o aumento da temperatura. Quando a temperatura tende a zero, a energia reduzida fornece o valor $u = -11$. As descontinuidades vistas no gráfico indicam os pontos de transição de fase, nos quais temos as temperaturas críticas, sendo que para $D/J = 4,5$ e $D/J = 4,55$ as transições são de primeira ordem, o que se caracteriza pelo “salto” (descontinuidade) indicado pelas linhas tracejadas.

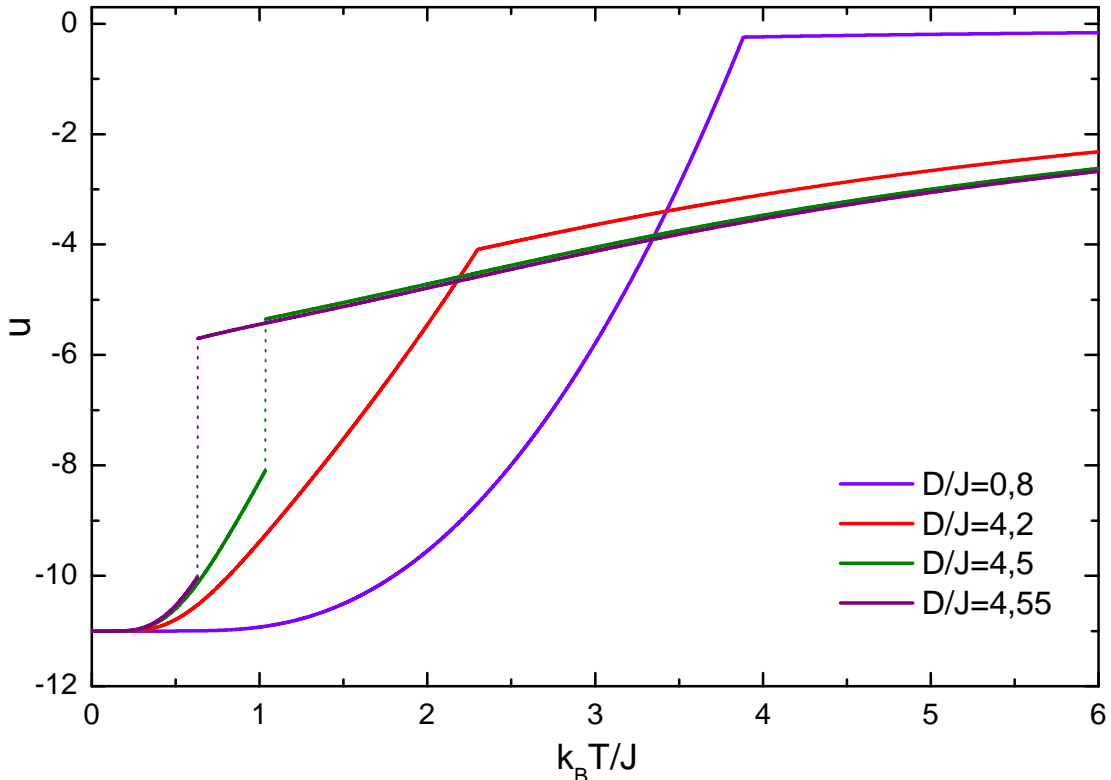


Figura 30 – Energia interna em função da temperatura com $\Delta = 1$ para valores constantes de D/J .

Calor específico

Novamente por diferenciação numérica da energia interna obtém-se o gráfico do calor específico c em função da temperatura $k_B T_c/J$: $c = \partial u / \partial T$, cujas transições são indicadas pelas descontinuidades nas curvas.

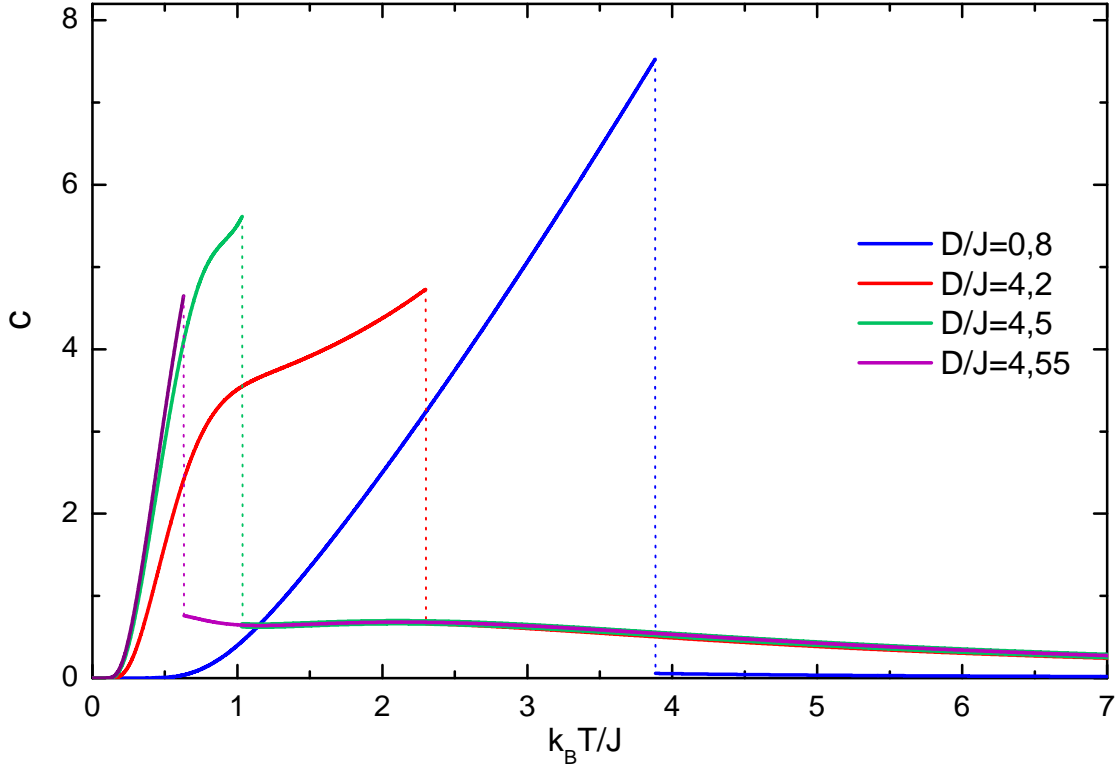


Figura 31 – Calor específico em função da temperatura com $\Delta = 1$ para valores constantes de D/J .

Susceptibilidade magnética

A susceptibilidade magnética a campo nulo, $\chi = \left. \frac{\partial m}{\partial h} \right|_{h=0}$, usando m da Eq. (3.20), é dada por:

$$\chi = \frac{\Omega_1}{\Omega_2}, \quad (3.22)$$

sendo:

$$\begin{aligned} \Omega_1 = 2K \bigg[& 2 \cosh(2\gamma_0) + 4e^{\frac{K}{2}} \cosh(2\gamma_0) \cosh\left(\frac{KX}{2}\right) + 10e^K \cosh(2\gamma_0) \cosh(\gamma_0) \cosh(KW) \\ & + e^{-K} \cosh(\gamma_0) \cosh(KW) + 2e^{-\frac{K}{2}} \cosh(\gamma_0) \cosh(KW) \cosh\left(\frac{KX}{2}\right) \\ & + 4e^{2K} - 8e^K \sinh(2\gamma_0) \sinh(\gamma_0) \cosh(KW) + 4 \cosh^2(KW) \bigg], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Omega_2 = & e^{-2K} - 8K(z-1)e^{2K} + 4 \cosh(2\gamma_0) - 4K(z-1) \cosh(2\gamma_0) \\
& + 4e^{-K} \cosh^2\left(\frac{KX}{2}\right) - 8Kze^{\frac{K}{2}} \cosh(2\gamma_0) \cosh\left(\frac{KX}{2}\right) \\
& + 16Ke^{\frac{K}{2}} \cosh(2\gamma_0) \cosh\left(\frac{KX}{2}\right) + 8K \cosh^2(KW) + 4e^{-\frac{3K}{2}} \cosh\left(\frac{KX}{2}\right) \\
& - 8Kz \cosh^2(KW) + 4e^{2K} \cosh^2(2\gamma_0) + 16 \cosh^2(\gamma_0) \cosh^2(KW) \\
& + 16e^K \cosh(2\gamma_0) \cosh(\gamma_0) \cosh(KW) + 16e^{-\frac{K}{2}} \cosh(\gamma_0) \cosh(KW) \cosh\left(\frac{KX}{2}\right) \\
& - 2K(z-1)e^{-K} \cosh(\gamma_0) \cosh(KW) + 8e^{-K} \cosh(\gamma_0) \cosh(KW) \\
& - 4K(z-1)e^{-\frac{K}{2}} \cosh(\gamma_0) \cosh(KW) \cosh\left(\frac{KX}{2}\right) \\
& - 20K(z-1)e^K \cosh(2\gamma_0) \cosh(\gamma_0) \cosh(KW) \\
& + 16K(z-1)e^K \sinh(2\gamma_0) \sinh(\gamma_0) \cosh(KW),
\end{aligned}$$

$$\text{com } X = \sqrt{8w + K^2} \text{ e } W = \sqrt{(1 - \Delta)^2 + (D/J)^2}.$$

O gráfico da Fig. 32 mostra o comportamento da susceptibilidade a campo nulo em função da temperatura reduzida para a rede cúbica simples com parâmetro anisotrópico $\Delta = 1$, para valores constantes $D/J = 4, 5, 4, 55$. As curvas apresentam a ocorrência de descontinuidades na temperatura crítica de primeira ordem.

De maneira geral, todas as propriedades termodinâmicas possuem um comportamento similar (qualitativamente falando) ao caso spin 1/2.

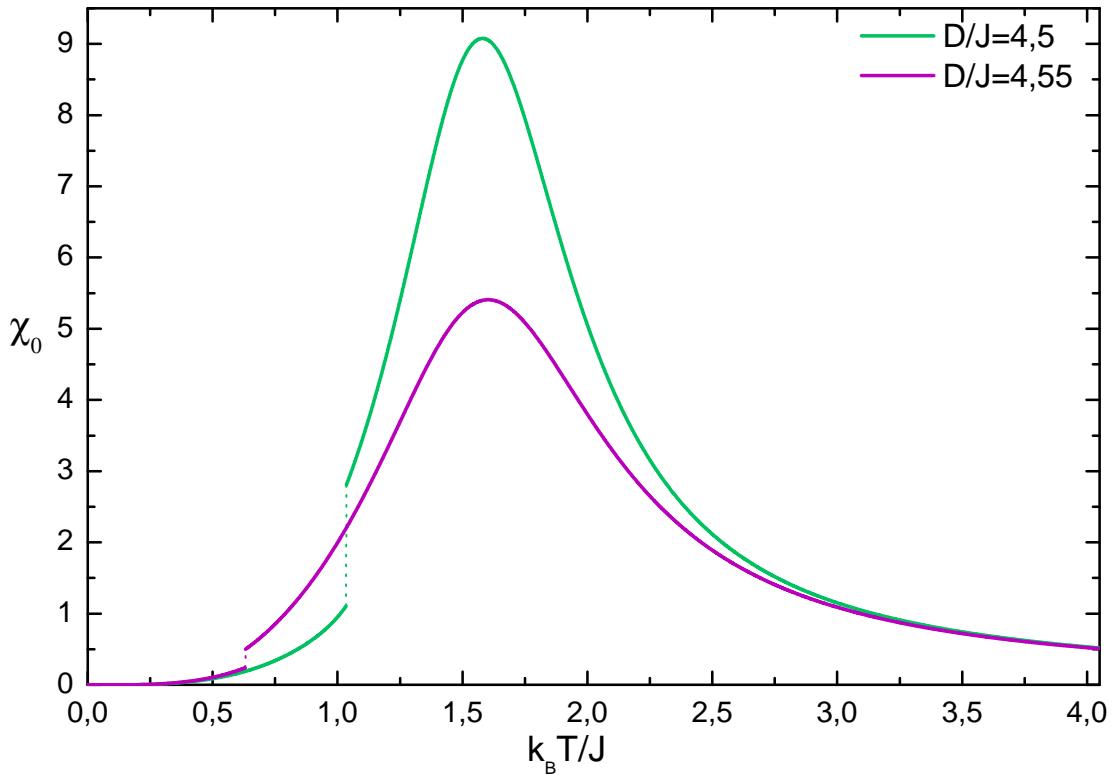


Figura 32 – Susceptibilidade magnética a campo nulo para valores constantes D/J com $\Delta = 1$.

3.3 Considerações finais

Conforme foi mostrado nas seções anteriores, quando se considera $p = 1$ (ausência de campo aleatório) na distribuição trimodal, os diagramas de temperatura crítica vs. D/J mostram que os pontos tricríticos são localizados em temperaturas independentes do valor de Δ (parâmetro anisotrópico de troca) tanto para spin 1/2 quanto para spin 1. Isso segue ocorrendo também na presença do campo aleatório, ou seja, para quaisquer valores fixos do campo h e da probabilidade p que governa a distribuição trimodal considerada, $K_B T_c/J$ independe do valor Δ tomado.

Para mostrar um exemplo, foram mantidos constantes os valores de $p = 0,1$ e $h = 1$ e plotados os diagramas com $\Delta = 0$, $\Delta = 0,3$, e $\Delta = 1$ para ambos os modelos, conforme se observa nas Figs. 33 e 34.

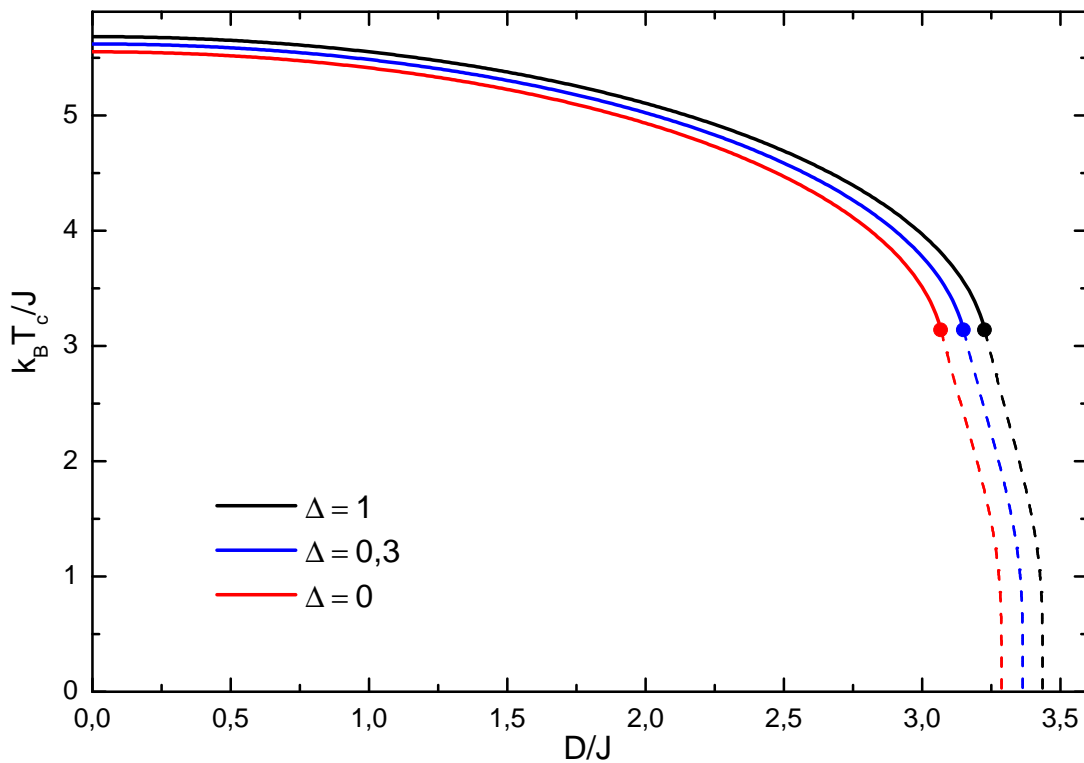


Figura 33 – Diagrama de fases $k_B T_c/J \times D/J$ para $p = 0,1$ e $h = 1$ para diferentes valores de Δ no modelo spin 1/2.

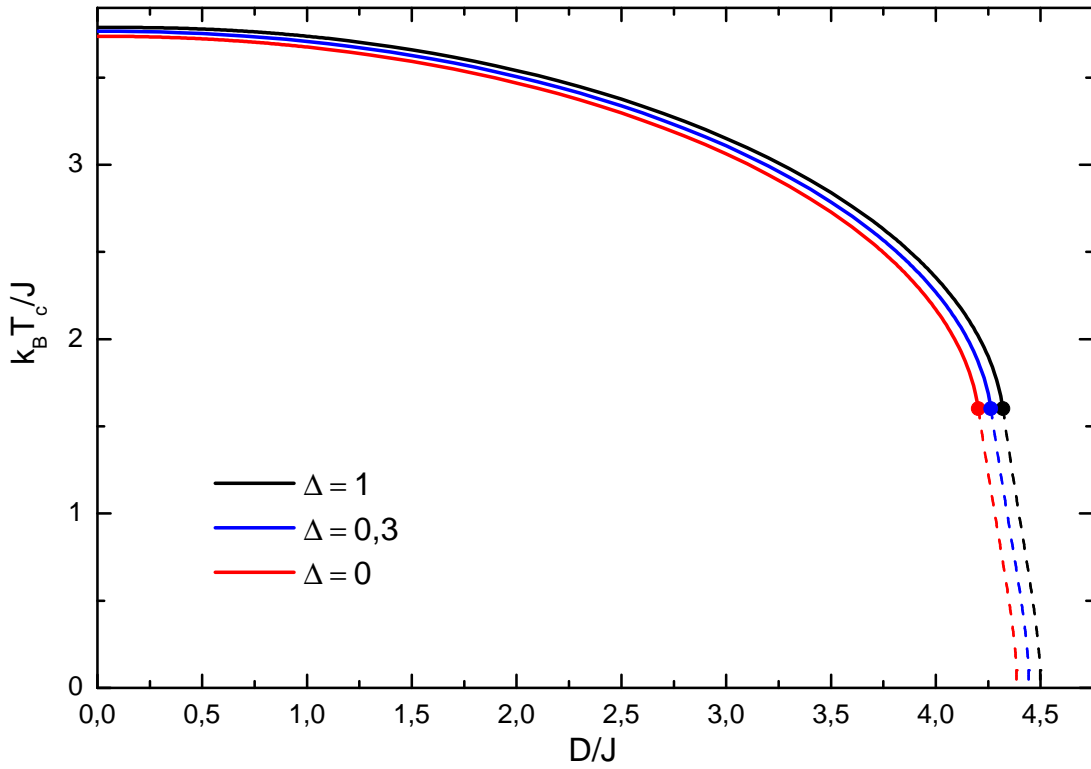


Figura 34 – Diagrama de fases $k_B T_c / J \times D / J$ para $p = 0,1$ e $h = 1$ para diferentes valores de Δ no modelo spin 1.

Todo o formalismo desenvolvido até aqui tratou de uma aproximação para dois sítios. Entretanto, é razoável uma tentativa de implementar uma abordagem para *clusters* maiores a fim de se conseguir uma melhoria na estimativa das propriedades descritas pelo modelo. Apesar do maior esforço computacional, espera-se que os resultados sejam melhorados, o que motiva uma investigação neste sentido. Desse modo, em 2016 Santos Filho [67] realizou uma abordagem para três sítios na rede kagomé utilizando o modelo de Heisenberg spin 1/2 ferromagnético com interação DM através do formalismo da aproximação de pares. Lamentavelmente não foi identificada a presença de ponto tricrítico no sistema, como seria esperado. Contudo, uma abordagem do mesmo sistema para spin 1 na presença de campo cristalino (com a interação DM ausente) resulta em ponto tricrítico no diagrama de fases, conforme será mostrado no presente trabalho. O desenvolvimento do modelo é apresentado a seguir.

3.3.1 Modelo de Heisenberg com anisotropia de campo cristalino

O Hamiltoniano do sistema na presença de anisotropia de íon único e campo magnético externo é dado por:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \left[(1 - \Delta)(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z \right] - D \sum_i (S_i^z)^2 - H \sum_i S_i^z, \quad (3.23)$$

Este modelo pode ser aplicado aos *clusters* ilustrados na Fig. 35.

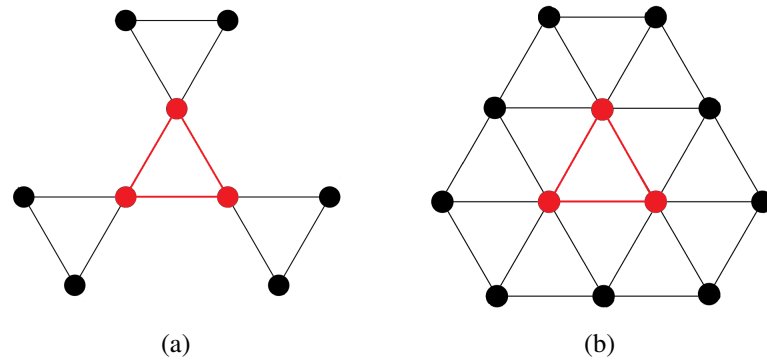


Figura 35 – Representação esquemática de *clusters* com três spins nas redes: (a) kagomé ($z = 4$) e (b) triangular ($z = 6$).

Realizando uma abordagem analítica similar à apresentada nas seções anteriores, as equações necessárias para a construção dos diagramas de fase são facilmente obtidas. Nas Figs. 36 e 37 são apresentados os diagramas $k_B T_c / J \times D / J$ nas redes kagomé e triangular. Um caso do modelo de Heisenberg com anisotropia de campo cristalino para número de coordenação $z = 4$ (estrutura diamante) em *cluster* de dois sítios pode ser visto na Ref. [34]. Como usualmente ocorre neste caso, os pontos tricríticos possuem temperaturas que dependem do valor Δ tomado. As coordenadas dos PTCs são dados na Tab. 4.

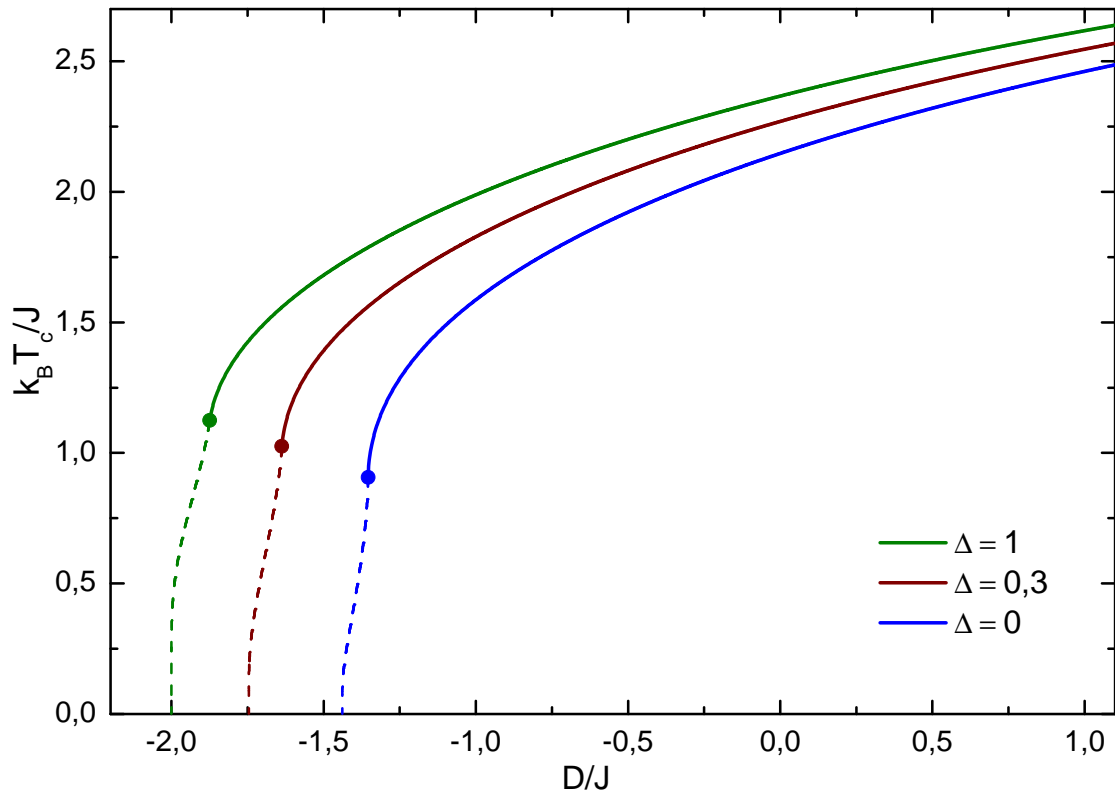


Figura 36 – Diagrama de fases $k_B T_c / J \times D / J$ para a rede kagomé ($z = 4$).

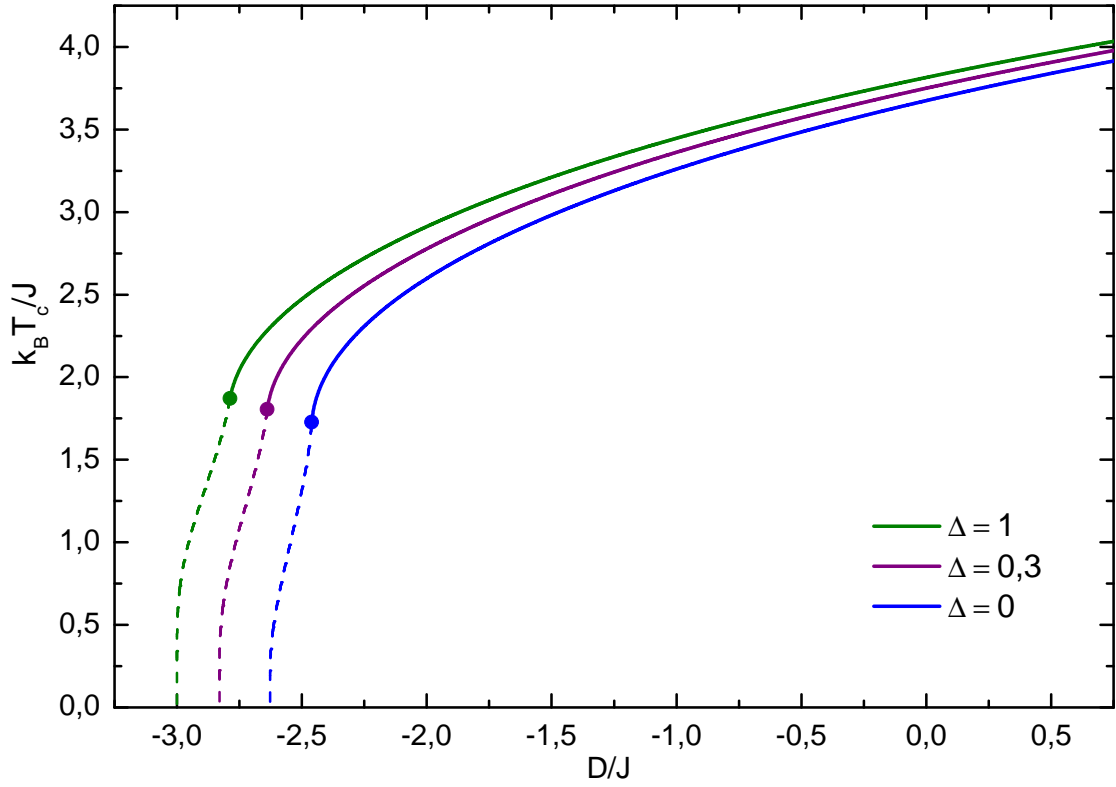


Figura 37 – Diagrama de fases $k_B T_c / J \times D / J$ para a rede triangular ($z = 6$).

Tabela 4 – Coordenadas dos pontos tricríticos das redes kagomé e triangular.

$z = 4$			$z = 6$		
Δ	T_t	D_t	Δ	T_t	D_t
0	0,906	-1,354	0	1,728	-2,460
0,3	1,025	-1,637	0,3	1,805	-2,639
1	1,125	-1,874	1	1,871	-2,788

Por se estender além dos objetivos desta dissertação, não serão apresentados aqui os gráficos de propriedades termodinâmicas deste modelo.

Outro caso interessante diz respeito ao que os autores [Jiang e Kong](#) denominam de Ising quântico [68], uma variação do modelo de Baxter-Wu com três spins interagentes, cujo Hamiltoniano é dado por:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ijk \rangle} S_i^z \cdot (\mathbf{S}_j \times \mathbf{S}_k)^z - D \sum_i (S_i^z)^2 \quad (3.25)$$

Para o caso spin 1 com anisotropia de campo cristalino foram obtidas transições de segunda e primeira ordem. Consequentemente, vê-se a presença de ponto tricrítico no diagrama de fases. A abordagem foi desenvolvida para uma rede triangular ($z = 6$). Resultados prévios nossos obtidos a partir da troca do termo anisotrópico de campo cristalino pela interação DM

para a mesma topologia para o caso spin 1/2 também indicam a existência de ponto tricrítico nesse sistema. Neste caso, a aproximação para três sítios é dada por:

$$-\beta\mathcal{H}_{123} = K[S_1^z \cdot (\mathbf{S}_2 \times \mathbf{S}_3)^z + S_2^z \cdot (\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_3)^z + S_3^z \cdot (\mathbf{S}_2 \times \mathbf{S}_1)^z] + L[(\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2)^z + (\mathbf{S}_2 \times \mathbf{S}_3)^z + (\mathbf{S}_3 \times \mathbf{S}_1)^z]$$

Uma investigação mais detalhada deste modelo deverá ser feita em breve.

4

Conclusões

Foi realizado um estudo a respeito das propriedades termodinâmicas do modelo de Heisenberg ferromagnético para os casos spin 1/2 e spin 1, aplicado à rede cúbica simples. Para tanto, foi empregada a técnica de aproximação de pares ou método de Oguchi. As discussões elaboradas com base nas propriedades críticas foram apresentadas no [Capítulo 3](#). Os diagramas de fase tridimensionais $k_B T_c \times D/J \times h$ e $k_B T_c \times h \times p$ mapeiam as regiões de criticalidade do modelo, revelando a presença de pontos tricríticos.

O comportamento tricrítico aparece pela contribuição tanto do campo magnético aleatório quanto da interação Dzyaloshinskii-Moriya. Ambos os efeitos contribuem conjuntamente levando o sistema ao estado desordenado, devido à competição com a interação de troca. A interação J tende a alinhar paralelamente os spins, enquanto o parâmetro DM e o campo aleatório contribuem para a quebra deste alinhamento.

No limite $D/J \rightarrow 0$, eliminando-se a contribuição da interação DM, temos o modelo de Heisenberg com campo aleatório numa distribuição trimodal. Neste caso, para anisotropia $\Delta = 1$ (modelo de Ising), foi investigado o comportamento crítico da temperatura em relação ao campo, mostrando a presença de pontos tricríticos. A tricriticalidade desaparece a partir de um dado valor de p , de modo que ocorrem transições de primeira ordem no intervalo $0 \leq p \leq 0,266$ no caso spin 1/2 e $0 \leq p \leq 0,249$ para o caso spin 1, que são resultados próximos dos obtidos por [Mattis \[18\]](#) no modelo de Ising tradicional (RFIM), com as variáveis clássicas $\sigma_i = \pm 1$. O caso Heisenberg isotrópico $\Delta = 0$ será investigado futuramente.

Os resultados são estendidos ainda à descrição do comportamento das propriedades termodinâmicas do sistema no limite do modelo de Ising ($\Delta = 1$) e na ausência de campo magnético. Em síntese, os resultados obtidos podem ser utilizados para o tratamento de outros modelos e/ou redes cristalinas distintas, conforme a discussão na [Seção 3.3](#), uma vez que o comportamento na região crítica é qualitativamente equivalente em tais casos.

Em relação às perspectivas, dentre as possibilidades de investigação estão o aumento do *cluster*, bem como do número de spin do modelo, considerações que podem fornecer melhores resultados. O tratamento para spin 3/2, por exemplo, e de casos spin 1/2 e spin 1 em *clusters*

maiores serão investigados futuramente. Também deverá ser realizada uma abordagem via teoria de campo efetivo [69], levando-se em conta, além disso, efeitos de desordem magnética modelados por diluição com a finalidade de aplicações experimentais em compostos tais como ligas metálicas desordenadas.

Referências

- 1 ASHCROFT, N.; MERMIN, N. *Solid State Physics*. [S.l.]: Holt, Rinehart and Winston, 1976. (HRW international editions). ISBN 9780030839931. Citado na página 11.
- 2 WHITE, R. M. *Quantum theory of magnetism: magnetic properties of materials*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2007. v. 32. Citado na página 11.
- 3 SKOMSKI, R. *Simple models of magnetism*. [S.l.]: Oxford University Press on Demand, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 12.
- 4 NOLTING, W.; RAMAKANTH, A. *Quantum theory of magnetism*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2009. Citado na página 11.
- 5 PARKINSON, J. B.; FARNELL, D. J. *An Introduction to Quantum Spin Systems*. [S.l.]: Springer Berlin Heidelberg, 2010. (Lecture Notes in Physics 816). Citado na página 12.
- 6 BLUNDELL, S. *Magnetism in condensed matter*. [S.l.]: AAPT, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 28.
- 7 YEOMANS, J. M. *Statistical mechanics of phase transitions*. [S.l.]: Clarendon Press, 1992. Citado na página 12.
- 8 HERBUT, I. *A modern approach to critical phenomena*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2007. Citado na página 12.
- 9 SALINAS, S. R. *Introdução à física estatística*. [S.l.]: Edusp, 1997. Citado 4 vezes nas páginas 12, 14, 24 e 27.
- 10 REICHL, L. E. *A modern course in statistical physics*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 13.
- 11 BRENNEN, C. E. *Cavitation and bubble dynamics*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2013. Citado na página 12.
- 12 WEI, G.-Z.; MIAO, H.-L. CONDENSED MATTER: ELECTRONIC STRUCTURE, ELECTRICAL, MAGNETIC, AND OPTICAL PROPERTIES: Mean-Field Studies of a Mixed Spin-3/2 and Spin-2 and a Mixed Spin-3/2 and Spin-5/2 Ising System with Different Anisotropies. *Communications in Theoretical Physics*, v. 51, p. 756–760, 2009. Citado na página 13.
- 13 FILHO, J. da C.; GODOY, M.; ARRUDA, A. de. Phase diagram of the mixed spin-2 and spin-5/2 Ising system with two different single-ion anisotropies. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 392, n. 24, p. 6247–6254, 2013. Citado na página 13.

- 14 SUN, G.-H.; KONG, X.-M. Phase diagram and tricritical behavior of the spin-1 Heisenberg model with Dzyaloshinskii–Moriya interactions. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 370, n. 2, p. 585–590, 2006. Citado 3 vezes nas páginas 13, 32 e 49.
- 15 PEREZ, N.; MARTINEZ, E.; TORRES, L.; WOO, S.-H.; EMORI, S.; BEACH, G. Chiral magnetization textures stabilized by the Dzyaloshinskii–Moriya interaction during spin-orbit torque switching. *Applied Physics Letters*, AIP, v. 104, n. 9, p. 092403, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 28.
- 16 MERMIN, N. D.; WAGNER, H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one-or two-dimensional isotropic Heisenberg models. *Physical Review Letters*, APS, v. 17, n. 22, p. 1133, 1966. Citado na página 13.
- 17 STANLEY, H.; KAPLAN, T. On the Possible Phase Transition for Two-Dimensional Heisenberg Models. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 38, n. 3, p. 975–976, 1967. Citado na página 13.
- 18 MATTIS, D. C. Tricritical point in random-field Ising model. *Physical review letters*, APS, v. 55, n. 27, p. 3009, 1985. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 60.
- 19 ARRUDA, A. D.; FIGUEIREDO, W.; SEBASTIANES, R.; SAXENA, V. Field distributions and tricritical points in a random-field Ising model: mean-field renormalization-group approach. *Physical Review B*, APS, v. 39, n. 7, p. 4409, 1989. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 28.
- 20 KAUFMAN, M.; KLUNZINGER, P. E.; KHURANA, A. Multicritical points in an Ising random-field model. *Physical Review B*, APS, v. 34, n. 7, p. 4766, 1986. Citado na página 13.
- 21 SEBASTIANES, R. M.; SAXENA, V. Phase diagram of the random-field Ising model with a trimodal distribution. *Physical Review B*, APS, v. 35, n. 4, p. 2058, 1987. Citado na página 13.
- 22 SOUSA, J. R.; LACERDA, F.; FITTIPALDI, I. P. Thermodynamic properties of the anisotropic Heisenberg model with Dzyaloshinsky–Moriya interaction. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 258, n. 1, p. 221–229, 1998. Citado 6 vezes nas páginas 13, 24, 30, 38, 40 e 42.
- 23 STRECKA, J.; JASCUR, M. A brief account of the Ising and Ising-like models: Mean-field, effective-field and exact results. *arXiv preprint arXiv:1511.03031*, 2015. Citado 3 vezes nas páginas 14, 21 e 24.
- 24 KANEYOSHI, T.; TUCKER, J.; JAŠČUR, M. Differential operator technique for higher spin problems. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 186, n. 3-4, p. 495–512, 1992. Citado na página 14.
- 25 KANEYOSHI, T. Differential operator technique in the Ising spin systems. *ACTA PHYSICA POLONICA SERIES A*, POLISH ACADEMY OF SCIENCES WARSAW, v. 83, p. 703–703, 1993. Citado na página 14.
- 26 LANDAU, D. P.; BINDER, K. *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*. [S.l.]: Cambridge university press, 2014. Citado na página 14.
- 27 BLUME, M. Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in UO_2 . *Physical Review*, APS, v. 141, n. 2, p. 517, 1966. Citado na página 14.

- 28 CAPEL, H. On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. *Physica*, Elsevier, v. 32, n. 5, p. 966–988, 1966. Citado na página 14.
- 29 WU, F.-Y. The potts model. *Reviews of modern physics*, APS, v. 54, n. 1, p. 235, 1982. Citado na página 14.
- 30 KOSTERLITZ, J. The critical properties of the two-dimensional xy model. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, IOP Publishing, v. 7, n. 6, p. 1046, 1974. Citado na página 14.
- 31 MEYER, S.; DUPÉ, B.; FERRIANI, P.; HEINZE, S. Dzyaloshinskii-moriya interaction at an antiferromagnetic interface: First-principles study of fe/ir bilayers on rh (001). *Physical Review B*, APS, v. 96, n. 9, p. 094408, 2017. Citado na página 14.
- 32 SCHWABL, F. *Statistical Mechanics*. [S.l.]: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006. (Advanced Texts in Physics). Citado 2 vezes nas páginas 9 e 18.
- 33 ALBUQUERQUE, D. F. *Estudo de Sistemas Magnéticos Desordenados por Métodos de Grupo de Renormalização*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Pernambuco, 1996. Citado na página 21.
- 34 DELY, J.; STRECKA, J.; CANOVA, L. Phase diagram of the spin-1 anisotropic Heisenberg model with a single-ion anisotropy. *arXiv preprint cond-mat/0611212*, 2006. Citado 4 vezes nas páginas 24, 30, 32 e 57.
- 35 ONSAGER, L. Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition. *Physical Review*, APS, v. 65, n. 3-4, p. 117, 1944. Citado na página 27.
- 36 RÖSSLER, U.; BOGDANOV, A.; PFLEIDERER, C. Spontaneous skyrmion ground states in magnetic metals. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 442, n. 7104, p. 797, 2006. Citado na página 28.
- 37 YI, S. D.; ONODA, S.; NAGAOSA, N.; HAN, J. H. Skyrmions and anomalous Hall effect in a Dzyaloshinskii-Moriya spiral magnet. *Physical Review B*, APS, v. 80, n. 5, p. 054416, 2009. Citado na página 28.
- 38 THIO, T.; AHARONY, A. Weak Ferromagnetism and Tricriticality in Pure La_2CuO_4 . *Physical review letters*, APS, v. 73, n. 6, p. 894, 1994. Citado na página 28.
- 39 SOUSA, J. R. *Modelos Decorados com Frustração Magnética: Aplicação a Supercondutores de Altas Temperaturas*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Pernambuco, 1994. Citado na página 28.
- 40 VAHEDI, J.; SOLTANI, M.; MAHDAVIFAR, S.; AKHOUNDI, M. Quantum Correlations in Three-Qubit Ising Model with Added dzyaloshinskii–Moriya Interaction. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, Springer, v. 27, n. 7, p. 1729–1736, 2014. Citado na página 28.
- 41 MAMTIMIN, T.; AHMAD, A.; RABIGUL, M.; ABLIMIT, A.; PAN-PAN, Q. Various Correlations in the Anisotropic Heisenberg XYZ Model with Dzyaloshinski—Moriya Interaction. *Chinese Physics Letters*, IOP Publishing, v. 30, n. 3, p. 030303, 2013. Citado na página 28.

- 42 DA-CHUANG, L.; ZHUO-LIANG, C. Thermal entanglement in the anisotropic Heisenberg XYZ model with different Dzyaloshinskii–Moriya couplings. *Chinese Physics Letters*, IOP Publishing, v. 26, n. 2, p. 020309, 2009. Citado na página 28.
- 43 ZHU, Y.; ZHANG, Y. Quantum discord in the three-spin XXZ chain with Dzyaloshinskii–Moriya interaction. *SCIENCE CHINA Physics, Mechanics & Astronomy*, Springer, p. 1–7, 2012. Citado na página 28.
- 44 ZIDAN, N. Quantum Discord of a Two-Qubit Anisotropy XXZ Heisenberg Chain with Dzyaloshinskii–Moriya Interaction. *Journal of Quantum Information Science*, Scientific Research Publishing, v. 4, n. 02, p. 104, 2014. Citado na página 28.
- 45 BRODUTCH, A.; TERNO, D. R. Why should we care about quantum discord? In: *Lectures on General Quantum Correlations and their Applications*. [S.l.]: Springer, 2017. p. 183–199. Citado na página 28.
- 46 HENDERSON, L.; VEDRAL, V. Classical, quantum and total correlations. *Journal of physics A: mathematical and general*, IOP Publishing, v. 34, n. 35, p. 6899, 2001. Citado na página 28.
- 47 OLLIVIER, H.; ZUREK, W. H. Quantum discord: a measure of the quantumness of correlations. *Physical review letters*, APS, v. 88, n. 1, p. 017901, 2001. Citado na página 28.
- 48 LARKIN, A. Effect of Inhomogeneties on the Structure of the Mixed State of Superconductors. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*, v. 31, p. 784, 1970. Citado na página 28.
- 49 IMRY, Y.; MA, S. K. Random-field instability of the ordered state of continuous symmetry. *Physical Review Letters*, APS, v. 35, n. 21, p. 1399, 1975. Citado na página 28.
- 50 FISHER, D. S.; GRINSTEIN, G. M.; KHURANA, A. Theory of random magnets. *Physics Today*, American Institute of Physics, v. 41, n. 12, p. 56–67, 1988. Citado na página 28.
- 51 CARDY, J. L. Random-field effects in site-disordered Ising antiferromagnets. *Physical Review B*, APS, v. 29, n. 1, p. 505, 1984. Citado na página 28.
- 52 AKINCI, Ü. Critical behavior of the 3D anisotropic quantum Heisenberg model in a trimodal random field distribution. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier, v. 333, p. 156–161, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 29.
- 53 AHARONY, A. Tricritical points in systems with random fields. *Physical Review B*, APS, v. 18, n. 7, p. 3318, 1978. Citado na página 28.
- 54 SCHNEIDER, T.; PYTTE, E. Random-field instability of the ferromagnetic state. *Physical Review B*, APS, v. 15, n. 3, p. 1519, 1977. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 32.
- 55 ALBUQUERQUE, D. F.; ARRUDA, A. S. Heisenberg model in a random field: phase diagram and tricritical behavior. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 316, n. 1, p. 13–18, 2002. Citado na página 29.
- 56 ALBUQUERQUE, D. F. de; ALVES, S. R. L.; ARRUDA, A. S. de. Critical behavior in a random field classical Heisenberg model for amorphous systems. *Physics Letters A*, v. 346, n. 1, p. 128 – 132, 2005. Citado na página 29.

- 57 SOUSA, J. R. de; ALBUQUERQUE, D. F. de; ARRUDA, A. S. de. Study of the first-order phase transition in the classical and quantum random field Heisenberg model on a simple cubic lattice. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 391, n. 12, p. 3361 – 3365, 2012. Citado na página [29](#).
- 58 SANTOS FILHO, A.; ALBUQUERQUE, D.; SANTOS-FILHO, J. B.; BATISTA, T. A. Phase diagram of the classical Heisenberg model in a trimodal random field distribution. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 461, p. 133 – 139, 2016. Citado na página [29](#).
- 59 FERNÁNDEZ, F. M. Application of the Kronecker product to simple spin systems. *arXiv preprint arXiv:1707.01933*, 2017. Citado na página [31](#).
- 60 STEEB, W.-H.; HARDY, Y. *Matrix calculus and Kronecker product: a practical approach to linear and multilinear algebra*. [S.l.]: World Scientific, 2011. Citado na página [31](#).
- 61 STEEB, W.-H. *Problems and Solutions in Theoretical and Mathematical Physics: Volume II: Advanced Level*. [S.l.]: World Scientific, 2003. Citado na página [31](#).
- 62 ZHANG, H.; DING, F. On the Kronecker products and their applications. *Journal of Applied Mathematics*, Hindawi Publishing Corporation, v. 2013, 2013. Citado na página [31](#).
- 63 SOUSA, J. R.; ALBUQUERQUE, D. F.; FITTIPALDI, I. P. Tricritical behavior of a Heisenberg model with Dzyaloshinski-Moriya interaction. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 191, n. 3-4, p. 275–278, 1994. Citado 2 vezes nas páginas [32](#) e [38](#).
- 64 MARITAN, A.; SWIFT, M. R.; CIEPLAK, M.; CHAN, M. H.; COLE, M. W.; BANAVAR, J. R. Ordering and phase transitions in random-field Ising systems. *Physical review letters*, APS, v. 67, n. 14, p. 1821, 1991. Citado na página [32](#).
- 65 SOUSA, J. R.; LACERDA, F.; FITTIPALDI, I. P. Thermal behavior of a Heisenberg model with DM interaction. *Journal of magnetism and magnetic materials*, Elsevier, v. 140, p. 1501–1502, 1995. Citado na página [38](#).
- 66 POLYANIN, A. D.; MANZHIROV, A. V. *Handbook of mathematics for engineers and scientists*. [S.l.]: CRC Press, 2006. Citado na página [44](#).
- 67 SANTOS FILHO, A. *Propriedades Magnéticas do Modelo de Heisenberg nas Aproximações de Campo Médio e Efetivo*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Sergipe, 2016. Citado na página [55](#).
- 68 JIANG, H.; KONG, X.-M. Thermodynamic properties and phase diagrams of spin-1 quantum Ising systems with three-spin interactions. *arXiv preprint arXiv:1111.4888*, 2011. Citado na página [58](#).
- 69 LACERDA, F.; SOUSA, J. R.; FITTIPALDI, I. P. Thermodynamical properties of a Heisenberg model with Dzyaloshinski–Moriya interactions. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 75, n. 10, p. 5829–5831, 1994. Citado na página [61](#).

Apêndices

A

Produto de Kronecker e matrizes de spins

Sejam A e B duas matrizes de dimensões $k \times \ell$ e $m \times n$, respectivamente. O produto de Kronecker de A e B é a matriz C de dimensão $km \times \ell n$ definida por:

$$C \equiv A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots & a_{1\ell}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \cdots & a_{2\ell}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1}B & a_{k2}B & \cdots & a_{k\ell}B \end{bmatrix}, \quad (\text{A.1})$$

onde a_{hj} denota o elemento de A na linha h e coluna j .

Note que o produto de Kronecker de duas matrizes de modo geral resulta numa outra matriz de maior dimensão. Esta operação, na literatura, pode ser também chamada de produto tensorial ou produto direto entre matrizes.

Algumas propriedades básicas são (considerando as matrizes A , B e C):

(i) Linearidade:

$$A \otimes (\alpha B) = \alpha(A \otimes B) = (\alpha A) \otimes B$$

(ii) Distributividade e associatividade:

$$(A + B) \otimes C = (A \otimes C) + (B \otimes C)$$

$$A \otimes (B + C) = (A \otimes B) + (A \otimes C)$$

$$(A \otimes B) \otimes C = A \otimes (B \otimes C)$$

(iii) Assumindo que o número de colunas de A é igual ao número de linhas de C e similarmente para B e D , então:

$$(A \otimes B)(C \otimes D) = AC \otimes BD$$

(iv) Se A and B são quadradas e inversíveis, vale:

$$(A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1}$$

Para o tratamento de sistemas de múltiplos spins interagentes, como é o caso do modelo de Heisenberg, uma definição essencial é a seguinte:

$$\sigma_j^\alpha = \overbrace{I \otimes \cdots \otimes I \otimes \sigma^\alpha \otimes I \otimes \cdots \otimes I}^{N \text{ fatores}}, \quad (\text{A.2})$$

\Downarrow
 j -ésima posição

onde I é uma matriz identidade, σ^α é a matriz de Pauli (com $\alpha = x, y, z$) na j -ésima posição, sendo $j = 1, 2, \dots, N$ (N diz respeito ao número de sítios em um *cluster*).

Outra propriedade muito importante diz respeito à soma de Kronecker de M_{mm} e N_{nn} definida por:

$$M \oplus N = M \otimes I_{nn} + I_{mm} \otimes N, \quad (\text{A.3})$$

que pode ser vista também como uma consequência da definição (A.2)¹.

As matrizes de Pauli de spin 1/2 e a matriz identidade 2x2 são dadas por:

$$\sigma^x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}; \quad \sigma^y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}; \quad \sigma^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}; \quad I_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.4})$$

Para o caso spin 1, por sua vez, teremos:

$$\sigma^x = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}; \quad \sigma^y = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}; \quad \sigma^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}; \quad I_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

As matrizes necessárias para a aplicação do produto de Kronecker são obtidas através das propriedades de comutação dos operadores de momento angular. São muito conhecidas da Mecânica Quântica e estão disponíveis em várias fontes (ver, por exemplo, <http://easyspin.org/documentation/spinoperators.html>).

Da definição (A.1), o termo $\sigma^x \sigma^y$ para o caso spin 1/2, por exemplo, será dado explicitamente por:

$$\sigma^x \otimes \sigma^y = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} & 1 \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \\ 1 \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} & 0 \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

¹ Por exemplo: $S_1^z + S_2^z = S^z \otimes I + I \otimes S^z \equiv S^z \oplus S^z$.

Usando a definição (A.2) e as matrizes de Pauli (A.5), alguns termos para um sistema spin 1 num *cluster* com $N = 3$, por exemplo, serão escritos da seguinte maneira:

$$\sigma_1^z = \sigma^z \otimes I_3 \otimes I_3 \quad (\text{A.6})$$

$$\sigma_2^z = I_3 \otimes \sigma^z \otimes I_3 \quad (\text{A.7})$$

$$\sigma_1^z \sigma_2^z = \sigma^z \otimes \sigma^z \otimes I_3 \quad (\text{A.8})$$

$$\sigma_2^x \sigma_3^x = I_3 \otimes \sigma^x \otimes \sigma^x \quad (\text{A.9})$$

$$\sigma_3^y \sigma_1^y = \sigma^y \otimes I_3 \otimes \sigma^y \quad (\text{A.10})$$

Explicitando o último termo (A.10), através da definição (A.1), obtém-se:

$$\begin{aligned} \sigma_3^y \sigma_1^y &= \sigma^y \otimes I_3 \otimes \sigma^y \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

E assim são construídos todos os demais termos, representando na forma matricial o Hamiltoniano do modelo considerado. Referências para consulta mais aprofundada e formal em relação a detalhes deste apêndice estão indicadas na [pág. 31](#).

B

Média configuracional da magnetização e energia livre

Média configuracional da magnetização calculada a partir da Eq. (3.7) utilizando (3.4) e (3.6) no modelo spin 1/2:

$$\begin{aligned}
 \langle m \rangle_c &= \iint dh_2 P(h_2) dh_1 P(h_1) \left[\frac{\sinh(2\gamma_0 + h_1 + h_2)}{\cosh(2\gamma_0 + h_1 + h_2) + e^{-2K} \cosh(\sqrt{(h_1 - h_2)^2 + 4w})} \right] \\
 \langle m \rangle_c &= p \left[\frac{p \sinh(2\gamma_0)}{\cosh(2\gamma_0) + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{w})} + \frac{1-p}{2} (A + B) \right] + \frac{1-p}{2} \left[p(A + B) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1-p}{2} \left(\frac{\sinh(2\gamma_0 + 2h)}{\cosh(2\gamma_0 + 2h) + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{w})} + \frac{\sinh(2\gamma_0)}{\cosh(2\gamma_0) + e^{-2K} \cosh(\Gamma)} \right) \right] \quad (\text{B.1}) \\
 &\quad \left. + \frac{1-p}{2} \left(\frac{\sinh(2\gamma_0 - 2h)}{\cosh(2\gamma_0 - 2h) + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{w})} + \frac{\sinh(2\gamma_0)}{\cosh(2\gamma_0) + e^{-2K} \cosh(\Gamma)} \right) \right]
 \end{aligned}$$

sendo que:

$$\begin{aligned}
 \gamma_0 &= K(z-1)m \\
 A &= \frac{\sinh(2\gamma_0 + h)}{\cosh(2\gamma_0 + h) + e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w})} \\
 B &= \frac{\sinh(2\gamma_0 - h)}{\cosh(2\gamma_0 - h) + e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w})} \\
 \Gamma &= 2\sqrt{h^2 + w} \\
 w &= K^2 [(1-\Delta)^2 + (D/J)^2]
 \end{aligned}$$

Analogamente, a média configuracional da energia livre será dada por:

$$\begin{aligned}
\langle f \rangle_c = (z-1)m^2 - \frac{1}{K} \Big\{ & p \ln \left(2e^K \left(\cosh(2K(z-1)m) + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{w}) \right) \right) \\
& + \frac{1-p}{2} \left(\ln \left(2e^K \left(\cosh(2K(z-1)m + h) + e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}) \right) \right) \right. \\
& + \ln \left(2e^K \left(\cosh(2K(z-1)m - h) + e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}) \right) \right) \Big) \\
& + \frac{1-p}{2} \left[p \ln \left(2e^K \left(\cosh(2K(z-1)m + h) + e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}) \right) \right) \right. \\
& + \frac{1-p}{2} \left(\ln \left(2e^K \left(\cosh(2K(z-1)m + 2h) + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{w}) \right) \right) \right. \\
& + \ln \left(2e^K \left(\cosh(2K(z-1)m) + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{h^2 + w}) \right) \right) \\
& + p \ln \left(2e^K \left(\cosh(2K(z-1)m - h) + e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}) \right) \right) \\
& + \frac{1-p}{2} \left(\ln \left(2e^K \left(\cosh(2K(z-1)m) + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{h^2 + w}) \right) \right) \right. \\
& \left. \left. + \ln \left(2e^K \left(\cosh(2K(z-1)m - 2h) + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{w}) \right) \right) \right) \right] \Big\}
\end{aligned}$$

As médias configuracionais para o caso spin 1 não serão explicitadas aqui, pois são consideravelmente maiores, contudo as expressões são análogas ao caso spin 1/2 e podem ser facilmente obtidas pelo mesmo procedimento.

C

Coeficientes da expansão de Landau

Coeficientes a e b da expansão (3.9) para o modelo spin 1/2:

$$\begin{aligned}
 a = p & \left[\frac{2pK(z-1)}{1+e^{-2K} \cosh(2\sqrt{w})} + \frac{1-p}{2} \left(\frac{4K(z-1) \cosh(h) + A_1 - A_2}{\cosh(h) + e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2+4w})} \right) \right] \\
 & + \frac{1-p}{2} \left[\frac{1-p}{2} \left(\frac{4K(z-1) \cosh(2h) - A_3 + A_4}{\cosh(2h) + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{w})} + \frac{4K(z-1)}{1+e^{-2K} \cosh(2\sqrt{h^2+w})} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{4pK(z-1) \cosh(h) + \frac{2p(e^{-2h}-1)}{1+e^{-2h}+2e^{-2K-h} \cosh(\sqrt{h^2+4w})} - \frac{2p(e^{2h}-1)}{1+e^{2h}+2e^{-2K+h} \cosh(\sqrt{h^2+4w})}}{\cosh(h) + e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2+4w})} \right],
 \end{aligned}$$

sendo:

$$\begin{aligned}
 A_1 &= \frac{(e^{-2h}-1) 2K(z-1) \sinh(h)}{1+e^{-2h}+2e^{-2K-h} \cosh(\sqrt{h^2+4w})} \\
 A_2 &= \frac{(e^{2h}-1) 2K(z-1) \sinh(h)}{1+e^{2h}+2e^{-2K+h} \cosh(\sqrt{h^2+4w})} \\
 A_3 &= \frac{(e^{4h}-1) 2K(z-1) \sinh(2h)}{1+e^{4h}+2e^{-2K+2h} \cosh(2\sqrt{w})} \\
 A_4 &= \frac{(e^{-4h}-1) 2K(z-1) \sinh(2h)}{1+e^{-4h}+2e^{-2K-2h} \cosh(2\sqrt{w})}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b = p & \left\{ \frac{4}{3} \frac{(e^{2h} - 1) K^3(z - 1)^3 \sinh(h)}{e^{2h} + 1 + 2e^{-2K+h} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w})} \right. \\
& + \frac{1-p}{2} \left[\left(\frac{4}{3} K^3(z - 1)^3 \cosh(h) - \frac{4}{3} \frac{(e^{2h} - 1) K^3(z - 1)^3 \sinh(h)}{e^{2h} + 1 + 2e^{-2K+h} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w})} \right. \right. \\
& - \frac{8K^3(z - 1)^3 e^h (2e^h + e^{-2K+2h} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}) + e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w})) \cosh(h)}{(1 + e^{2h} + 2e^{-2K+h} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}))^2} \\
& - \left. \left. \frac{8K^3(z - 1)^3 e^h \mathbf{B}_1 \sinh(h)}{(1 + e^{2h} + 2e^{-2K+h} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}))^3} \right) \frac{1}{\cosh(h) + e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w})} \right. \\
& + \left(\frac{4}{3} K^3(z - 1)^3 \cosh(h) + \frac{4}{3} \frac{(e^{-2h} - 1) K^3(z - 1)^3 \sinh(h)}{e^{-2h} + 1 + 2e^{-2K-h} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w})} \right. \\
& - \frac{8K^3(z - 1)^3 e^{-h} (2e^{-h} + e^{-2K-2h} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}) + e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w})) \cosh(h)}{(1 + e^{-2h} + 2e^{-2K-h} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}))^2} \\
& - \left. \left. \frac{8K^3(z - 1)^3 e^{-h} \mathbf{B}_2 \sinh(h)}{(1 + e^{-2h} + 2e^{-2K-h} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}))^3} \right) \frac{1}{\cosh(h) + e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w})} \right] \Bigg\} \\
& + \frac{1-p}{2} \left\{ \left[p \left(\frac{4}{3} K^3(z - 1)^3 \cosh(h) \right) + \frac{4}{3} \frac{p (e^{-2h} - 1) K^3(z - 1)^3 \sinh(h)}{e^{-2h} + 1 + 2e^{-2K-h} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w})} \right. \right. \\
& - \frac{8pK^3(z - 1)^3 e^{-h} (2e^{-h} + e^{-2K-2h} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}) + e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w})) \cosh(h)}{(e^{-2h} + 1 + 2e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}) e^{-h})^2} \\
& - \left. \left. \frac{8pK^3(z - 1)^3 \mathbf{B}_3 (e^{-2h} - 1) e^{-h} \sinh(h)}{(e^{-2h} + 1 + 2e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}) e^{-h})^3} \right] \frac{1}{\cosh(h) + e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w})} \right. \\
& + \frac{1-p}{2} \left[\left(\frac{4}{3} K^3(z - 1)^3 \cosh(2h) + \frac{4}{3} \frac{(e^{-4h} - 1) K^3(z - 1)^3 \sinh(2h)}{e^{-4h} + 1 + 2e^{-2K-2h} \cosh(2\sqrt{w})} \right. \right. \\
& - \frac{8K^3(z - 1)^3 e^{-2h} (2e^{-2h} + e^{-2K-4h} \cosh(2\sqrt{w}) + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{w})) \cosh(2h)}{(e^{-4h} + 1 + 2e^{-2K-2h} \cosh(2\sqrt{w}))^2} \\
& + \left. \left. \frac{8K^3(z - 1)^3 e^{-2h} \mathbf{B}_4 \sinh(2h)}{(e^{-4h} + 1 + 2e^{-2K-2h} \cosh(2\sqrt{w}))^3} \right) \frac{1}{\cosh(2h) + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{w})} \right. \\
& + \left. \frac{4}{3} \frac{K^3(z - 1)^3 (-2 + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{h^2 + w}))}{(1 + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{h^2 + w}))^2} \right] \\
& + \left[\frac{4}{3} p K^3(z - 1)^3 \cosh(h) - \frac{4}{3} \frac{p (e^{2h} - 1) K^3(z - 1)^3 \sinh(h)}{e^{2h} + 1 + 2e^{-2K+h} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w})} \right. \\
& - \left. \left. \frac{8pK^3(z - 1)^3 e^h (2e^h + e^{2h} e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}) + e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w})) \cosh(h)}{(e^{2h} + 1 + 2e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}) e^h)^2} \right] \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{8pK^3(z-1)^3 (e^{2h} - 1) e^h B_5 \sinh(h)}{(e^{2h} + 1 + 2e^{-2K+h} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}))^3} \left[\frac{1}{\cosh(h) + e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w})} \right. \\
& + \frac{1-p}{2} \left[\left(\frac{4}{3} K^3(z-1)^3 \cosh(2h) + \frac{4}{3} \frac{(e^{4h} - 1) K^3(z-1)^3 \sinh(h)}{e^{4h} + 1 + 2e^{-2K+2h} \cosh(2\sqrt{w})} \right. \right. \\
& - \frac{8K^3(z-1)^3 e^{2h} (2e^{2h} + e^{-2K+4h} \cosh(2\sqrt{w}) + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{w})) \cosh(2h)}{(e^{4h} + 1 + 2e^{-2K+2h} \cosh(2\sqrt{w}))^2} \\
& - \left. \left. \frac{8K^3(z-1)^3 e^{2h} B_6 \sinh(2h)}{(e^{4h} + 1 + 2e^{-2K+2h} \cosh(2\sqrt{w}))^3} \right) \frac{1}{\cosh(2h) + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{w})} \right. \\
& \left. \left. + \frac{4}{3} \frac{K^3(z-1)^3 (-2 + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{h^2 + w}))}{(1 + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{h^2 + w}))^2} \right] \right] \Bigg\},
\end{aligned}$$

onde:

$$\begin{aligned}
B_1 = & -4e^{3h} - e^{-2K+4h} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}) + 4e^h + 2e^{-4K+3h} \cosh^2(\sqrt{h^2 + 4w}) \\
& + e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}) - 2e^{-4K+h} \cosh^2(\sqrt{h^2 + 4w})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_2 = & 4e^{-3h} + e^{-2K-4h} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}) - 4e^{-h} - 2e^{-4K-3h} \cosh^2(\sqrt{h^2 + 4w}) \\
& - e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}) + 2e^{-4K-h} \cosh^2(\sqrt{h^2 + 4w})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_3 = & 4e^{-h} + e^{-2K-2h} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}) + e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}) \\
& - 2e^{-4K-h} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_4 = & -4e^{-6h} - e^{-2K-8h} \cosh(2\sqrt{w}) + 4e^{-2h} + 2e^{-4K-6h} \cosh^2(2\sqrt{w}) \\
& + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{w}) - 2e^{-4K-2h} \cosh^2(2\sqrt{w})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_5 = & -4e^h - e^{-2K+2h} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}) - e^{-2K} \cosh(\sqrt{h^2 + 4w}) \\
& + 2e^{-4K+h} \cosh^2(\sqrt{h^2 + 4w})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_6 = & -4e^{6h} - e^{-2K+8h} \cosh(2\sqrt{w}) + 4e^{2h} + 2e^{-4K+6h} \cosh^2(2\sqrt{w}) \\
& + e^{-2K} \cosh(2\sqrt{w}) - 2e^{-4K+2h} \cosh^2(2\sqrt{w})
\end{aligned}$$

Os coeficientes da expansão para o modelo com spin 1 são análogos, mas com expressões que não caberiam em poucas páginas, de modo que não serão mostradas aqui.